

Nanoskopischer Elektronentransport in topologischen Materialien

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

durch die Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen

von **Sebastian Bauer**, geboren am 27. Januar 1988 in Emmerich,
am 23. Februar 2018 der Fakultät für Physik in Duisburg vorgelegt

Erster Gutachter	Prof. Dr. Rolf Möller
Zweiter Gutachter	Prof. Dr. Bert Voigtländer
Datum der Disputation	14. Mai 2018

*»Wir machen uns innere Scheinbilder oder Symbole
der äußeren Gegenstände, und zwar machen wir sie von solcher Art,
daß die denknotwendigen Folgen und Bilder stets wieder die Bilder seien
von den naturnotwendigen Folgen der abgebildeten Gegenständen.«*

Heinrich Hertz, Gesammelte Werke Band III: Die Prinzipien der Mechanik,
Verlag Johann Ambrosius Barth, Leipzig 1894, erste Seite.

Kurzfassung

Diese Arbeit behandelt den nanoskopischen Elektronentransport in dünnen Bismutselenid(Bi_2Se_3)- und Bismuttellurid(Bi_2Te_3)-Schichten auf Si(111). Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 gehören zu der neuen Materialklasse der topologischen Isolatoren (TI). Diese Materialien haben eine Bandlücke in ihrem Inneren, die durch einen spinpolarisierten Oberflächenzustand geschlossen wird. Dieser wird durch die Topologie des Materials geschützt und ist daher sehr robust gegenüber nichtmagnetischen Defekten. Der lokale Elektronentransport in den TI-Filmen wurde mittels Rastertunnelpotentiometrie untersucht (STP), die eine Erweiterung der Rastertunnelmikroskopie (STM) darstellt, wobei zeitgleich die mikroskopische Topographie und das zugehörige elektrochemische Potential μ_{ec} der Probenoberfläche erfasst werden. Dabei unterstützen globale (μm -Skala) Mehrspitzenmessungen die lokalen (nm-Skala) STP-Messungen. In den TI-Filmen wird μ_{ec} durch einen konstanten Gradienten beherrscht. Zusätzlich zeigt μ_{ec} Sprünge an Stufenkanten und Domänengrenzen auf der Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Oberfläche, d. h., diese morphologischen Strukturen stellen Transportbarrieren für Leitungselektronen dar. Zudem treten bei manchen Proben Thermospannungssignale auf. Zusätzlich wird der Einfluss von Adsorbaten auf die Transporteigenschaften der TI-Filme untersucht: Während Bi-Inseln auf Bi_2Se_3 -Filmen den Leitwert erhöhen, haben Eiseninseln auf Bi_2Te_3 -Filmen keinen signifikanten Einfluss auf den Elektronentransport.

Abstract

This thesis covers the nanoscale electron transport in thin films of bismuth selenide (Bi_2Se_3) and bismuth telluride (Bi_2Te_3) on Si(111). Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 belong to the new material class of topological insulators (TI). These materials are insulating in their bulk while they provide a metallic, spin-polarized surface state. The surface state is protected by the material's topology which leads to a high robustness against non-magnetic defects. The local electron transport of the TI films was studied by scanning tunneling potentiometry (STP), an extension of the scanning tunneling microscope (STM) which gives access to the microscopic topography and the corresponding electrochemical potential μ_{ec} of the surface simultaneously. The local (nm-scale) STP measurements are supported by global (μm -scale) multi point probe studies. The STP analysis shows that the local electron transport in the TI film is dominated by a constant gradient of μ_{ec} . In addition, μ_{ec} drops suddenly at step edges and domain boundaries on the Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 surface. Therefore, these morphological structures are transport barriers for conduction electrons. For some samples thermovoltage signals were observed as well. Additionally, the influence of adsorbates on the transport properties of the TI films is studied. While Bi islands on Bi_2Se_3 films lead to an increased sheet conductance, additional iron islands on Bi_2Te_3 films have no significant influence on the electron transport.

Kürzel	Bedeutung
1D-,2D-,3D	ein-, zwei-, dreidimensional
2DEG	zweidimensionales Elektronengas
2PP	Zweipunktsonde (engl. <i>two point probe</i>)
4PP	Vierpunktsonde (engl. <i>two point probe</i>)
AE	Augerelektronen
Au	Gold (lat. <i>aurum</i>)
Ag	Silber (lat. <i>argentum</i>)
AG	Arbeitsgruppe
ARPES	winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie (engl. <i>angle resolved photoelectron spectroscopy</i>)
BE	Rückstreuelektronen (engl. <i>backscattered electrons</i>)
BEEM	ballistische Elektronenemissionsmikroskopie
Bi	Bismut
BL	Bilage
BZ	Brillouin-Zone
CEC	Fläche gleicher Energie (engl. <i>constant energy contour</i>)
DG	Domänengrenze
DOS	Zustandsdichte (engl. <i>density of states</i>)
DSP	digitaler Signalprozessor
EP	Extremalpunkt
Fe	Eisen (lat. <i>ferrum</i>)
IUPAC	Internationale Union für reine und angewandte Chemie (engl. <i>International Union of Pure and Applied Chemistry</i>)
IVC	Strom-Spannungs-Wandler (engl. <i>current(I)-to-voltage(V)-converter</i>)
JFET	Sperrschichtfeldeffekttransistor (engl. <i>junction field transistor</i>)
LDOS	lokale DOS
LEED	niederenergetische Elektronenbeugung (eng. <i>low energy electron diffraction</i>)
MBE	Molekularstrahlepitaxie (engl. <i>molecular beam epitaxy</i>)
MFP	mittlere freie Weglänge (engl. <i>mean free path</i>)
ML	Monolage
MPM	Mehrpunktmessung
QL	Quintupellage
RT	Raumtemperatur ($\approx 300\text{ K} \approx 25\text{ °C}$)
Se	Selen
SE	Sekundärelektronen
SEM	Rasterelektronenmikroskop (engl. <i>scanning electron microscope</i>)
Si	Silicium
SOC	Spin-Bahn-Kopplung (engl. <i>spin orbit coupling</i>)
STM	Rastertunnelmikroskop (engl. <i>scanning tunneling microscope</i>)
STS	Rastertunnelspektroskopie (engl. <i>scanning tunneling spectroscopy</i>)
STP	Rastertunnelpotentiometrie (engl. <i>scanning tunneling potentiometry</i>)
Te	Tellur
TI	topologischer Isolator
TRIM	zeitumkehrinvarianter k -Vektor (eng. <i>time reversal invariant momentum</i>)
TRS	Zeitumkehrsymmetrie (engl. <i>time reversal symmetry</i>)
TSS	topologischer Oberflächenzustand (engl. <i>topological surface state</i>)
UHV	Ultrahochvakuum
u	atomare Masseneinheit ($1\text{ u} = 1.66 \times 10^{-27}\text{ kg}$)
V_{pp}	Spannungsdifferenz (in Volt) von Spitze zu Spitze (engl. <i>Volt peak to peak</i>) bei einer Wechselspannung
VSTP	Vektorfeld-STP

Zeichen*	Bedeutung
a, \mathbf{a}	Abstand, Basisvektor
A	Fläche, Richardson-Konstante
b, \mathbf{b}	Breite, reziproker Basisvektor
d	Tunnelabstand, Abstand
D	Zustandsdichte
e	Elementarladung ($e = 1.602 \times 10^{-19}$ C)
E, \mathbf{E}	Energie, elektrisches Feld
E_F	Fermienergie (chemisches Potential bei $T = 0$ K)
f	Fermiverteilung
F	Quasi-Ferminiveau
G, \mathbf{G}	(Schicht-)Leitwert, reziproker Gittervektor
h	Plancksches Wirkungsquantum ($h = 6.626 \times 10^{-34}$ J·s)
\hbar	reduziertes Plancksches Wirkungsquantum ($\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34}$ J·s)
\hat{H}	Hamiltonoperator
I	elektrischer Strom, Teilchenstrom
j	elektrische Stromdichte
k, \mathbf{k}	Wellenvektor
k_B	Boltzmannkonstante ($k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K)
l	Länge
$\lambda, \boldsymbol{\lambda}$	Wellenlänge, mittlere freie Weglänge, Oberflächen-TRIM
$\Lambda, \boldsymbol{\Lambda}$	TRIM
κ	Abklingkonstante, Wärmeleitungskoeffizient
m	Masse
m_e	Elektronenmasse ($m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg)
m^*	effektive Masse
M	Molmasse, Tunnelmatrixelement
μ	chemisches Potential, Aufdampftrate
N	Teilchenzahl
N_A	Avogadrokonstante ($N_A = 6.022 \times 10^{23}$ mol $^{-1}$)
n	Elektronendichte, Stoffmenge
ν	topologische Invariante
φ	Barrierrhöhe, mittlere Austrittsarbeit
φ_{SB}	Schottkybarriere
ϕ	elektrostatisches Potential
ψ	Wellenfunktion
r, \mathbf{r}	Ionisationsgrad, Radius, Ortsvektor
P, \hat{P}	elektrische Leistung, Paritätsoperator
p	Druck, Paritätseigenwert
R, \mathbf{R}	Widerstand, Krümmungsradius, Gittervektor
ρ	Massendichte
s	Abstand
\hat{S}	Spinoperator
σ	Leitfähigkeit
t	Zeit, Schichtdicke
T	absolute Temperatur, Tunnelwahrscheinlichkeit
τ	Relaxationszeit, Aufdampfzeit
ϑ, θ	Winkel
Θ	Zeitumkehroperator
u, \mathbf{u}	Blochwelle, Einheitsvektor
v	Geschwindigkeit
V	Volumen, Spannung, Potential

*Anmerkung: Vektorielle Größen (zum Beispiel das elektrische Feld) werden in dieser Arbeit fett gedruckt (\mathbf{E}), ihre Beträge dagegen kursiv (E).

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
2	Methoden.....	5
2.1	Rastertunnelmikroskopie (STM).....	5
2.1.1	Prinzip des Rastertunnelmikroskops (STM).....	5
2.1.2	Tunneleffekt	6
2.1.3	STM-Theorie	9
2.1.4	Abbildungsfehler im STM	12
2.2	Rastertunnelpotentiometrie (STP)	14
2.2.1	Prinzip der STP.....	14
2.2.2	Elektronischer Transport und lokales Potential	15
2.2.3	Thermospannung	24
2.2.4	Artefakte in der STP.....	26
2.3	Mehrpunktmessungen (MPM)	27
2.3.1	Dimensionscharakter der Leitfähigkeit	27
2.3.2	Stromdichte für schicht- und volumenleitende Proben	28
2.3.3	Zweipunktmessung (2PP)	29
2.3.4	Vierpunktmessung (4PP)	30
2.4	Rasterelektronenmikroskop (SEM).....	33
2.4.1	Prinzip des SEM	33
2.4.2	Abbildungsvorgang beim SEM.....	34
2.5	Niederenergetische Elektronenbeugung (LEED)	36
2.5.1	LEED-Apparatur	36
2.5.2	Reziproker Raum und Beugung bei LEED	37
3	Experiment	39
3.1	Messapparatur.....	39
3.1.1	Präparationskammer.....	41
3.1.2	Analysekammer	42
3.2	Vierspitzen-STM.....	43
3.2.1	Aufbau des Vierspitzen-STM	43
3.2.2	Spitzenbühnen	44
3.2.3	Spitzenträger	47
3.2.4	Datenerfassung und Datenverarbeitung.....	49
3.3	Spitzenpräparation	54
3.3.1	Präparation von Wolframspitzen	54
3.3.2	Präparation von Goldspitzen	56
3.4	Probenpräparation.....	57
3.4.1	Probenhalter	57
3.4.2	Sputtern.....	58
3.4.3	Molekularstrahlepitaxie (MBE)	59
3.4.4	Doppelverdampfer (Eigenbau)	62

4	Probensystem	65
4.1	Benutzte Materialien	65
4.1.1	Silicium (Si)	65
4.1.2	Bismut (Bi)	66
4.1.3	Selen (Se) und Tellur (Te).....	67
4.2	Aufbau der Schichtproben	68
4.2.1	Si(111)-(7x7)-Rekonstruktion	68
4.2.2	Si(111)-(√3×√3)R30°-Bi-Rekonstruktion	70
4.2.3	Schichten aus Bismutselenid (Bi ₂ Se ₃) und -tellurid (Bi ₂ Te ₃).....	71
4.3	Topologische Isolatoren (TI)	74
4.3.1	Topologie	74
4.3.2	Bandstruktur von TI	75
4.3.3	Topologische Grenzflächenzustände.....	79
4.4	Elektronische Eigenschaften von Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃.....	81
4.4.1	Bandstruktur.....	81
4.4.2	Quantenphasendiagramm.....	85
4.4.3	Elektrischer Transport	86
5	Studien an Bismutselenid	91
5.1	Bi-Rekonstruktion auf Si(111)	91
5.1.1	Präparation.....	91
5.1.2	2PP-Messungen	93
5.1.3	STP-Messungen	94
5.1.4	Diskussion.....	96
5.2	Bi₂Se₃-Film mit einer Schichtdicke von 4.5 QL	98
5.2.1	Präparation.....	98
5.2.2	2PP-Messung	100
5.2.3	STP-Messung	101
5.2.4	Diskussion.....	105
5.3	Bi₂Se₃-Film mit einer Schichtdicke von 14.5 QL.....	108
5.3.1	Präparation.....	108
5.3.2	2PP-Messung	109
5.3.3	STP-Messung	110
5.3.4	STP-Studie einer 1 QL-Stufenkante.....	114
5.3.5	Diskussion.....	117
5.4	Gestufte Bi₂Se₃-Oberfläche	120
5.4.1	Präparation.....	120
5.4.2	2PP-Messung	123
5.4.3	4PP-Messung	124
5.4.4	STP-Messung	126
5.4.5	Diskussion.....	131
5.5	Bi-Inseln auf einer Bi₂Se₃-Oberfläche	135
5.5.1	Präparation.....	135
5.5.2	2PP-Messung	137
5.5.3	STP-Messung	138
5.5.4	Diskussion.....	140

6	Studien an Bismuttellurid	143
6.1	Bi₂Te₃-Film mit einer Schichtdicke von 14 QL.....	143
6.1.1	Präparation.....	143
6.1.2	2PP-Messung.....	145
6.1.3	4PP-Messung.....	146
6.1.4	STP-Messung	147
6.1.5	STP-Studie einer 1 QL-Stufenkante	149
6.1.6	Diskussion.....	152
6.2	Eisen auf einer Bi₂Te₃-Oberfläche.....	155
6.2.1	Präparation.....	155
6.2.2	4PP-Messung.....	157
6.2.3	STP-Messung	158
6.2.4	Diskussion.....	160
6.3	Volumenprobe Bi₂Te₃.....	161
6.3.1	Präparation.....	161
6.3.2	4PP-Messung.....	164
6.3.3	STP-Messung	165
6.3.4	Diskussion.....	168
7	Zusammenfassung	171
8	Ausblick	179
9	Anhang	183
9.1	Doppelverdampfer.....	183
9.1.1	Mechanischer Aufbau	183
9.1.2	Steuer- und Regelektronik.....	186
9.2	Kennlinien der MPM	194
9.2.1	Bi ₂ Se ₃ -Proben	194
9.2.2	Bi ₂ Te ₃ -Proben	197
9.3	STP-Studien an Stufenkanten.....	200
9.3.1	QL-Stufe auf der Bi ₂ Se ₃ -Oberfläche.....	200
9.3.2	QL-Stufe auf der Bi ₂ Te ₃ -Oberfläche.....	202
9.4	Programme für die STP-Datenanalyse	204
9.4.1	Simulierung von STP-Artefakten	204
9.4.2	Auswertungshilfe für Stufenkantenmessungen	220
	Literaturverzeichnis	227
	Danksagung.....	241

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung topologischer Isolatoren (TI) hinsichtlich ihres Elektronentransports auf der Nanoskala.

TI stellen einen völlig neuartigen Materialzustand dar, der 2005 von C. L. Kane und E. J. Mele im zweidimensionalen Material Graphen postuliert wurde [1]. Graphen bildet durch die Symmetrie seines wabenartigen 2D Gitters eine Bandstruktur aus, deren Energiedispersion an den reziproken Gitterpunkten K und K' in der Brillouinzone linear verläuft [2]. An der Fermienergie liegt dort ein Entartungspunkt vor, von dem aus sich die Bandstruktur zu höheren und kleineren Energien kegelförmig öffnet. Man kann diese Energiedispersion durch eine modifizierte Dirac-Gleichung mit masselosen Fermionen beschreiben, sodass man von Dirac-Kegeln mit einem Dirac-Punkt spricht. Kane und Mele haben postuliert, dass durch eine schwache Spin-Bahn-Kopplung in Graphen eine sehr kleine Bandlücke an den Dirac-Kegeln geöffnet wird [1]. Mit dieser Bandlücke würde ein Wechsel der Topologie der Bandstruktur einhergehen, der zu einem topologischen Randzustand führt, der die beiden Dirac-Kegeln miteinander verbindet und dabei die Bandlücken an beiden Dirac-Kegel schließt. Jedoch ist die Bandlücke so klein, dass sie bisher experimentell nicht zugänglich ist [3]. Man konnte einen solchen Randzustand stattdessen 2007 in CdTe/HgTe/CdTe Quantentrögen (engl. *quantum wells*) beobachten [4], weil die Spin-Bahn-Kopplung dort im Material stark genug ist [5]. Dies war der erste experimentell bestätigte TI, allerdings noch als 2D-Material. Im gleichen Jahr wurden 3D TI erstmals theoretisch von L. Fu, C. L. Kane und E. J. Mele [6] sowie J. E. Moore und L. Balents [7] beschrieben, wobei J. E. Moore und L. Balents den Begriff „topologischer Isolator“ prägten. 2008 konnte Hsieh et al. [8] den ersten 3D TI in Form von $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ identifizieren. Die in dieser Arbeit benutzten Materialien Bismutselenid (Bi_2Se_3) und Bismuttellurid (Bi_2Te_3) wurden 2009 durch Berechnungen von Zhang et al. [9] als 3D TI identifiziert. Zeitgleich wurden diese Ergebnisse für Bi_2Se_3 von Xia et al. [10] und für Bi_2Te_3 von Chen et al. [11] sowohl experimentell als auch durch Berechnungen bestätigt.

Was sind nun 3D TI eigentlich? Zunächst besitzen diese Materialien eine Bandstruktur, die eine Bandlücke aufweist und die topologisch nicht-trivial ist. Damit gehen spezielle Effekte – insbesondere bei Kontakt mit topologisch andersartigen Materialien – einher. Diese Klassifizierung von Bandstrukturen hinsichtlich ihrer Topologie statt Symmetrie ist in der Festkörperphysik völlig neu und hat zu einem deutlich erweiterten Verständnis des Zustands kondensierter Materie geführt [2], wobei nicht absehbar ist, welche neuen Eigenschaften und Phänomene daraus noch folgen werden [12]. Man schätzt heute, dass etwa 10-30 % aller Materialien eine nicht-triviale Topologie haben [12]. Um eine Bandstruktur mit einer nicht-trivialen Topologie in eine Bandstruktur mit einer trivialen Topologie umzuwandeln, muss die Bandlücke geschlossen werden.

Daher bildet ein TI, wenn er mit einem trivialen Material (auch das Vakuum zählt hierzu) in Berührung kommt, einen topologischen Oberflächenzustand aus, der die Bandlücke des TI schließt und mit der trivialen Bandstruktur verbindet. Der Oberflächenzustand ist dabei spinpolarisiert und die möglichen Streukanäle sind gegenüber einem trivialen System beschränkt. Der Oberflächenzustand ist Folge des Topologieunterschieds an der Oberfläche des TI und bleibt dort so lange bestehen, bis die Bandlücke des TI geschlossen wird. Daher sind die topologischen Oberflächenzustände sehr robust gegenüber nichtmagnetischen Defekten. Die hier untersuchten 3D TI Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 bilden an ihrer Oberfläche einen einzelnen Dirac-Kegel als Oberflächenzustand aus [9]. Bei Bi_2Se_3 entspricht der Oberflächenzustand fast einer idealen Kegelform, während bei Bi_2Te_3 der Oberflächenzustand zum Teil starke Einschnürungen (engl. *warping*) zeigt, die zu mehr Streuung in Bi_2Te_3 gegenüber Bi_2Se_3 führen, allerdings immer noch weniger als beim Oberflächenzustand eines trivialen Systems.

Mit der Erforschung der TI wird die Hoffnung verbunden, auch neue Materialien für die Herstellung von Computerprozessoren zu entwickeln. Die heutige Prozessorenentwicklung stößt zunehmend an ihre Grenzen, wie in einem Leitartikel von M. M. Waltrop in *Nature* 2016 ausgeführt wurde [13]: Die Entwicklung von Prozessoren folgt dem sogenannten Mooreschen Gesetz, das als empirische Beobachtung und Extrapolation in die Zukunft von G. E. Moore, Mitbegründer des Prozessorherstellers Intel, 1975 aufgestellt wurde [14]. Es besagt, dass sich die Dichte an Bauelementen in einem Computerprozessor alle zwei Jahre verdoppelt. Die These von Moore fiel in eine Zeit, in der sich die Computerindustrie zunehmend von den Geschäftskunden weg auf die Privatkunden hin konzentrierte, deren Bedürfnisse und Kaufverhalten durch eine immer weiter steigende Leistung der Computer, Spielekonsolen usw. von den jeweiligen in Konkurrenz befindlichen Firmen befriedigt werden musste. Daher ist das Mooresche Gesetz eine selbsterfüllende Prophezeiung, die die Prozessorhersteller anspornte und die Prozessorenentwicklung entsprechend vorantrieb.

Der Leistung eines Prozessors sind jedoch Grenzen gesetzt [13]: Die Größe des Chips für den Prozessor ist aus wirtschaftlichen, prozesstechnischen und anwendungsbezogenen Gründen begrenzt. Man konnte zwar bis heute die Größe von Leiterbahnen und Teilen von integrierten Schaltungen auf den Chips auf etwa 14 nm verringern, jedoch stößt die Miniaturisierung an ihre Grenzen: Ab einer Breite von etwa 2-3 nm treten parasitäre quantenmechanische Effekte auf, die den Betrieb des Bauelements zu sehr stören. Man erwartet, dass diese Grenze in den 2020ern erreicht sein wird [13]. Andere Hebel wie die Taktung des Prozessors, die Aufteilung auf mehrere Prozessorkerne oder die Platzierung von integrierten Schaltungen übereinander sind weitestgehend ausgereizt. Dabei ist der begrenzende Faktor zurzeit vor allem die entstehende Wärme beim Betrieb des Prozessors, die – wenn nicht wirkungsvoll abgeführt – die Lebensdauer des jeweiligen Bauelements, und damit des gesamten Prozessors, zu stark verringert. Man forscht daher entsprechend nach Materialkandidaten, die beim Betrieb des Prozessors weniger Abwärme erzeugen.

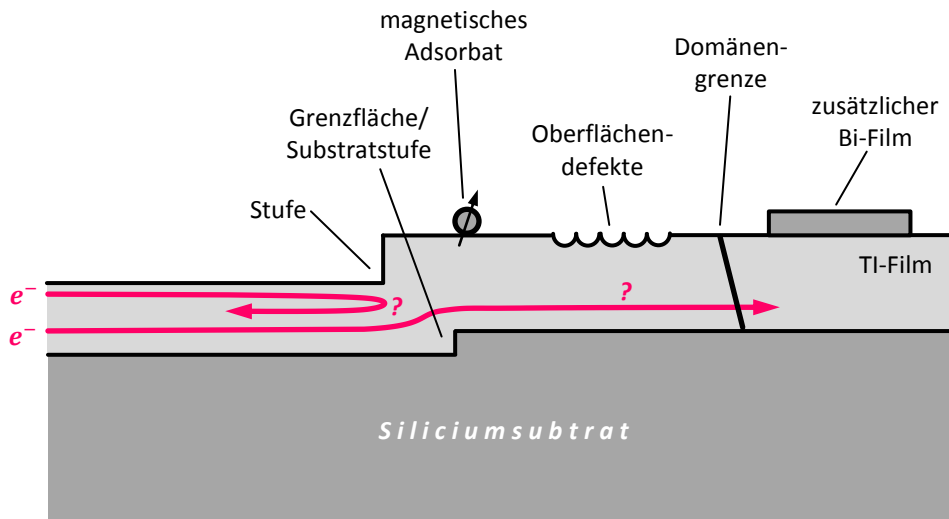


Bild 1.1| Nanoskopischer Elektronentransport in TI-Filmen auf Silicium. Die vorliegende Arbeit untersucht die Streuung von Leitungselektronen in dünnen TI-Filmen. Die Zeichnung zeigt mögliche Streuer im TI Film.

Die auch in dieser Arbeit untersuchten 3D TI sind solche Kandidaten. Zum einen gestattet der an ihrer Oberfläche auftretende Oberflächenzustand weniger elastische Streuung, sodass alleine hierdurch weniger Abwärme entsteht. Zum anderen ist der Oberflächenzustand in TI spinpolarisiert. Man versucht daher, Signale statt über einen Stromfluss (Bewegung von Elektronen) über das Umlappen von Elektronenspins (möglichst ohne Bewegung der Elektronen) dissipationsarm zu übertragen (sogenannte Spintronik = Elektronik mit Elektronenspin).

Diese Arbeit konzentriert sich vorrangig auf die Eigenschaften des Elektronentransports in 3D TI. Dabei werden vor allem dünne epitaktische Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Filme (4-16 nm) auf dem technologisch bedeutsamen Material Silicium untersucht. Diese Anordnung (epitaktischer dünner Film/Struktur auf Silicium) entspricht einer möglichen, künftigen Umsetzung als Bauteil in integrierten Schaltungen. Dabei ist von zentraler Bedeutung, ob und wie Leitungselektronen in den 3D TI-Filmen gestreut werden.

In Bild 1.1 sind mögliche Streuer in dünnen TI-Filmen für Leitungselektronen auf der atomaren Skala gezeigt, wie zum Beispiel Stufenkanten, magnetische Adsorbate oder Domänengrenzen. Folgende Fragestellungen sind mit dem Elektronentransport auf der Nanoskala verknüpft:

- Ist der nanoskopische Transport diffusiv oder ballistisch?
- Werden Leitungselektronen durch morphologische Strukturen gestreut?
- Können die Leitungseigenschaften der TI-Filme beeinflusst werden?

Diese Fragestellungen sollen im Rahmen dieser Dissertation untersucht und beantwortet werden. Hierzu kann auf eine äußerst vielseitige technische Messanlage zurückgegriffen werden, deren Herzstück ein Tunnelmikroskop mit vier Spitzen ist, die voneinander unabhängig auf einer Probe positioniert werden können. Folgende Vorteile kommen dabei zum Tragen:

- In-situ-Herstellung von Proben mittels Molekularstrahlepitaxie, sodass Proben gezielt selbst hergestellt und zügig ohne Kontakt mit Luft untersucht werden können.
- Variabler Aufbau von komplexeren Mehrpunktmessungen auf der Probe mit den vier Spitzen, d. h. Zugang zu Eigenschaften der Probe auf der μm - bis mm-Skala.
- Variabler Messaufbau einer Rastertunnelpotentiometrie auf der Probe, mit dem zeitgleich das Transportfeld der Leitungselektronen und die Probenoberfläche auf der nm-Skala beobachtet werden kann, wobei ein lateraler Querstrom wie in einem Bauteil fließt.

Hierdurch ist eine umfangreiche Untersuchung von Proben hinsichtlich ihrer globalen (μm -Skala) und lokalen (nm-Skala) Transporteigenschaften unter betriebsähnlichen Bedingungen möglich.

Im Rahmen der Promotion wurden auch Messdaten zum Elektronentransport in Bi_2Se_3 aus meiner Masterarbeit »Transport auf mikroskopischer Skala« [15] neu ausgewertet und interpretiert. Die zugehörigen Ergebnisse sind in den Kapiteln 5.2 und 5.3 der Dissertation gezeigt.

2 Methoden

2.1 Rastertunnelmikroskopie (STM)

Die Rastertunnelmikroskopie (engl. *scanning tunneling microscopy*, kurz STM) wurde 1981 durch G. Binnig und H. Rohrer entwickelt und ermöglicht die Untersuchung von Probenoberflächen mit atomarer Auflösung [16]. Das STM zählt heute zu einer Standardmethode in den Oberflächenwissenschaften und ist die fundamentale Arbeitstechnik in dieser Dissertation.

2.1.1 Prinzip des Rastertunnelmikroskops (STM)

Das Rastertunnelmikroskop (engl. *scanning tunneling microscope*, ebenfalls STM abgekürzt) benutzt eine feine Metallspitze, die über eine elektrisch leitfähige Probe rastert (siehe Bild 2.1). Dabei befindet sich die Spitze im Abstand weniger Atomdurchmesser über der Probenoberfläche, sodass Elektronen durch die Barriere zwischen Probe und Spitze quantenmechanisch hindurchtunneln können. Durch eine Tunnelspannung V_t gibt man dem Tunnelprozess eine Vorzugsrichtung und es ergibt sich ein Tunnelstrom I_t , dessen Stärke stark vom Abstand der Spitze zur Probe abhängt. Die Bewegung der Spitze erfolgt über Piezoelemente. Dies sind piezoelektrische Keramiken, die sich mit höchster Präzision durch eine angelegte Spannung ausdehnen oder zusammenziehen lassen, je nach Vorzeichen der Spannung. Hierdurch ist man in der Lage, den Tunnelstrom sehr genau über den Abstand der Spitze zur Probe einzustellen.

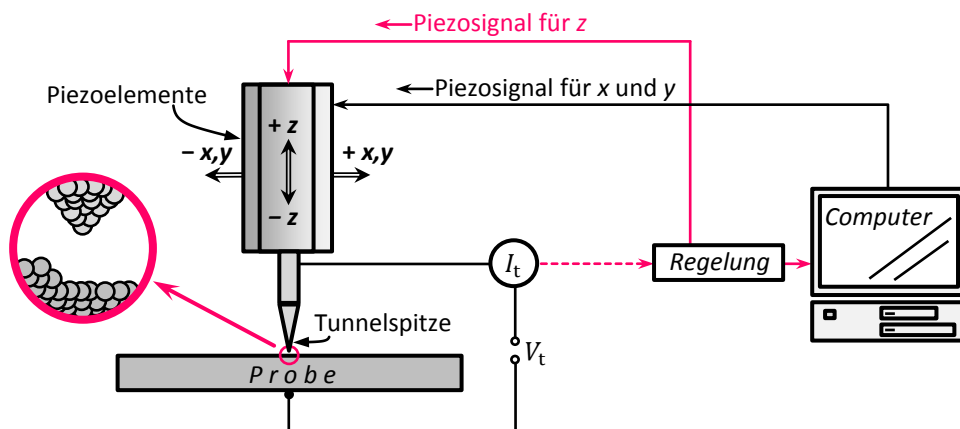


Bild 2.1 | Schema eines STM. Die Regelung des STM ändert die Höhe z der Tunnelspitze über das Piezoelement in der Weise, dass der Tunnelstrom I_t konstant bleibt. Die Höhenänderung z aufgetragen über die Rasterposition (x,y) der Spitze ergibt die sogenannte Topographie der Probenoberfläche. Zeichnung nach [15].

In dieser Arbeit wird im Konstant-Strom-Modus gearbeitet. Dabei verändert eine STM-Regelung die Höhe der Tunnelspitze während des Rasterns fortlaufend, sodass ein bestimmter Solltunnelstromwert eingehalten wird. Die Höhenänderung (z), aufgetragen über die Rasterposition der Tunnelspitze (x, y), ergibt die Topographie (von griech. *tópos* »Ort« und *gráphein* »schreiben«) der Probenoberfläche.

2.1.2 Tunneleffekt

Grundlage des STM ist der Tunneleffekt, der daher auch den Namen der Methode motivierte. Entgegen der klassischen Vorstellung besitzen Elektronen nicht nur Teilcheneigenschaften, sondern auch Welleneigenschaften. Hierdurch sind elektrische Zustände der Elektronen nicht scharf lokalisiert. Daher kann es zum Beispiel eine merkliche Überlappung zwischen einem elektronischen Zustand in der Tunnelspitze mit einem elektronischen Zustand der Probe geben, sodass die Elektronen zwischen beiden Zuständen tunneln können, ohne dass es einen physischen Kontakt zwischen Spitze und Probe gibt (sogenannter Tunnelkontakt).

Um den Tunneleffekt zwischen der Tunnelspitze und der Probe mathematisch zu beschreiben, wird im Folgenden ein einfaches Modell aus dem Jahr 1963 nach J. G. Simmons benutzt [17]. Simmons nahm zwei plane Metallelektroden an, die durch eine Barriere $\varphi(z)$ der Dicke d getrennt sind (siehe Bild 2.2). Die Elektronen in den Elektroden sollen sich wie ein freies Elektronengas verhalten. Die Barriere $\varphi(z)$ variere nur in der z -Richtung, sodass nur der z -Anteil der Elektronenenergie $E = m_e/2 \cdot v^2 = m_e/2 \cdot (v_{\parallel}^2 + v_z^2)$ für das Durchtunneln bedeutsam ist. Dabei ist m_e die Elektronenmasse, v die Geschwindigkeit der Elektronen und \parallel bezeichnet die zur Elektrodenoberfläche parallelen Anteile. Die Tunnelwahrscheinlichkeit T einer eindimensionalen Rechteckbarriere der Höhe φ_0 und der Breite z ist proportional zu $e^{-2\kappa z}$, wobei $\kappa = [2m_e(\varphi_0 - E_z)/\hbar^2]^{1/2}$ ist mit \hbar als reduziertes Plancksches Wirkungsquantum.

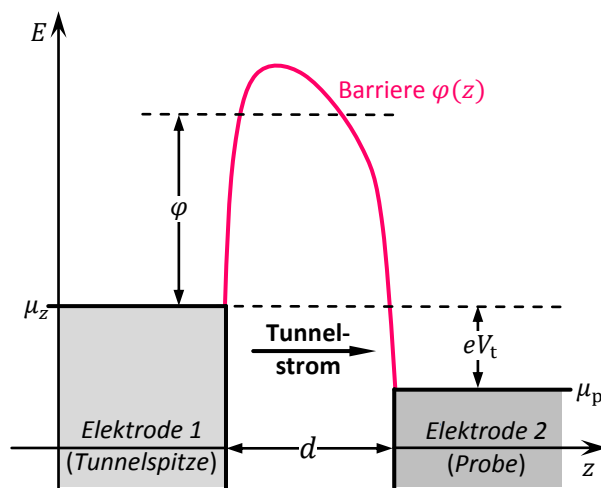


Bild 2.2| Tunneln nach Simmons. Der Tunnelvorgang wird für zwei plane Metallplatten im Abstand d mithilfe eines semiklassischen Ansatzes untersucht. Zeichnung nach [17].

Man kann sich nun die Barriere $\varphi(z)$ aus kleinen Rechteckbarrieren der Breite dz mit je $dT = e^{-2\kappa(z)dz}$ zusammengesetzt denken. Daher ergibt sich die Gesamttunnelwahrscheinlichkeit T aus dem Produkt der einzelnen Transmissionswahrscheinlichkeiten dT : $T = \prod e^{-2\kappa(z)dz} = e^{-2\int \kappa(z)dz}$. Es folgt für die Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere $\varphi(z)$ im infinitesimalen Grenzfall

$$T(E_z) = e^{-2\int \kappa(z)dz} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \sqrt{2m_e(\varphi(z) - E_z)} dz\right). \quad (2.1)$$

Gleichung (2.1) ist die sogenannte Wentzel-Kramers-Brillouin-Näherung, wobei implizit eine langsame Änderung der Barriere über die Wellenlänge der Elektronen angenommen wurde. Die Stromdichte der in z -Richtung von der ersten Elektrode („Tunnelspitze“ (s)) in die zweite Elektrode („Probe“ (p)) tunnelnden Elektronen ist mit $dE_z = m_e v_z dv_z$

$$j_{sp} = e \int_0^{v_{\max}} v_z n(v_z) T(E_z) dv_z = \frac{e}{m_e} \int_0^{E_{\max}} n(v_z) T(E_z) dE_z, \quad (2.2)$$

wobei das Integral nur bis zu einer Maximalgeschwindigkeit v_{\max} oder einer Maximalenergie E_{\max} der Elektronen läuft. e ist die Elementarladung und $n(v_z)dv_z$ die Elektronenzahl je Einheitsvolumen im Intervall $[v_z, v_z + dv_z]$ in der Tunnelspitze. Die Zustandsdichte eines freien Elektronengases im Geschwindigkeitsraum ist $2(m_e/h)^3 V$ mit h als Plancksches Wirkungsquantum. Es gilt für die Elektronendichte je Einheitsvolumen V im infinitesimalen Grenzfall

$$n(v) dv_x dv_y dv_z = 2 \left(\frac{m_e}{h}\right)^3 f_s(E, T) dv_x dv_y dv_z. \quad (2.3)$$

Dabei ist $f_s(E, T)$ die Fermiverteilung der Elektronen in der Spitze. Es gilt

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu(T)}{k_B T}\right) + 1}. \quad (2.4)$$

$\mu(T)$ ist das chemische Potential der Elektronen mit $f(\mu(T)) \equiv 1/2$, k_B ist die Boltzmannkonstante und T die absolute Temperatur der Elektronen. Aus Gleichung (2.3) folgt für die Elektronenzahl je Einheitsvolumen in der Tunnelspitze

$$n(v_z) = 2 \frac{m_e^3}{h^3} \iint_{-\infty}^{+\infty} f_s(E, T_s) dv_x dv_y. \quad (2.5)$$

Man vereinfacht das Integral durch den Wechsel von kartesischen Koordinaten in Polarkoordinaten. Bezeichne v_{\parallel} den zur Oberfläche parallelen Geschwindigkeitsanteil mit $v_{\parallel}^2 = v_x^2 + v_y^2$ und ϑ den Azimut, so folgt für das Volumenelement $v_{\parallel} dv_{\parallel} d\vartheta$ und es ergibt sich für das Integral in Gleichung (2.5)

$$n(v_z) = 2 \frac{m_e^3}{h^3} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} f_s(E, T_s) d\vartheta v_{\parallel} dv_{\parallel} = 4\pi \frac{m_e^3}{h^3} \int_0^{\infty} f_s(E, T_s) v_{\parallel} dv_{\parallel}. \quad (2.6)$$

Wechselt man die Koordinaten vom Geschwindigkeitsanteil zum Energieanteil $E_{\parallel} = m_e/2 \cdot v_{\parallel}^2$, so folgt mit $dE_{\parallel} = m_e v_{\parallel} dv_{\parallel}$

$$n(v_z) = 4\pi \frac{m_e^2}{h^3} \int_0^{\infty} f_s(E, T_s) dE_{\parallel}. \quad (2.7)$$

Damit ist die Stromdichte (Gleichung (2.2)) von der Spitze in die Probe hinein

$$j_{sp} = 4\pi \frac{e m_e}{h^3} \int_0^{E_{\max}} \int_0^{\infty} T(E_z) f_s(E, T_s) dE_{\parallel} dE_z. \quad (2.8)$$

Für die umgekehrte Stromdichte von der Probe in die Spitze folgt

$$j_{ps} = 4\pi \frac{e m_e}{h^3} \int_0^{E_{\max}} \int_0^{\infty} T(E_z) f_p(E, T_p) dE_{\parallel} dE_z. \quad (2.9)$$

Dabei unterscheiden sich die chemischen Potentiale der Spitze μ_s und der Probe μ_p um den Term eV_t (siehe auch Bild 2.2), d. h. $\mu_s = \mu_p + eV_t$ (vgl. Bild 2.2). Damit folgt $f_s(E, T_s) = f_p(E - eV_t, T_s)$. Die Nettotunnelstromdichte j_t zwischen Tunnelspitze und Probe ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} j_t &= j_{sp} - j_{ps} \\ &= 4\pi \frac{e m_e}{h^3} \int_0^{E_{\max}} \int_0^{\infty} T(E_z) \cdot [f_p(E - eV_t, T_s) - f_p(E, T_p)] dE_{\parallel} dE_z. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Sei nun $\varphi \equiv 1/d \cdot \int_0^d \varphi(z) dz$ die mittlere Tunnelbarrierenhöhe zwischen Spitze und Probe, wobei im Folgenden für die Tunnelspannung $eV_t \ll \varphi$ gelten soll. Weiterhin seien die Temperaturen in der Tunnelspitze und in der Probe gleich und niedrig mit $T \ll T_F = E_F/k_B$, wobei $E_F = \mu(0 \text{ K})$ als Fermienergie bezeichnet wird. Metalle (Fermitemperaturen T_F um einige 10'000 K) erfüllen diese Bedingung noch bei Raumtemperatur (300 K) recht gut. Unter diesen Bedingungen folgt als Näherung für die Tunnelstromdichte aus Gleichung (2.10)

$$j_t = \frac{e^2 \kappa}{4\pi^2 \hbar} \frac{V_t}{d} \cdot e^{-2\kappa d} \quad \text{mit } \kappa = \sqrt{2m_e \varphi} / \hbar. \quad (2.11)$$

Der Tunnelkontakt ist unter diesen Annahmen ohmsch, d. h. $j_t = \sigma_t \cdot V_t/d$. Für die Leitfähigkeit σ_t des Tunnelkontakts gilt $\sigma_t \sim e^{-2\kappa d}$. Typische Werte für die mittlere Tunnelbarriere φ liegen im Bereich einiger eV, sodass die Abklingkonstante κ etwa $1/(100 \text{ pm})$ beträgt. Daher ergibt eine Änderung des Tunnelabstands d um 100 pm (ca. einen Atomdurchmesser) eine Änderung der Tunnelleitfähigkeit und damit der Tunnelstromdichte um etwa eine Größenordnung. Dies erklärt die hohe Auflösung eines STM in z-Richtung.

2.1.3 STM-Theorie

1983 stellten J. Tersoff und D. R. Hamann eine erweiterte Tunneltheorie für das STM vor, bei der die geometrischen Verhältnisse im STM berücksichtigt werden [18]. Man vereinfacht hierfür die Tunnelspitze (bzw. deren Apex) zu einer Kugel mit Krümmungsradius R , die sich im Abstand d über der Probenoberfläche befindet (siehe Bild 2.3). Gemäß Störungstheorie erster Ordnung ergibt sich für den Gesamtstrom elastisch tunnelnder Elektronen

$$I_t = \frac{2\pi e}{\hbar} \cdot \sum_{s,p} [f_s(E_s, T_s) - f_p(E_p, T_p)] \cdot |M_{sp}|^2 \cdot \delta(E_s - E_p). \quad (2.12)$$

\hbar ist das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und $f_{s,p}(E_{s,p}, T_{s,p})$ ist die Fermiverteilung der Spitze (s) bzw. Probe (p) (siehe auch Gleichung (2.4)), wobei E die Elektronenenergie und T die absolute Temperatur in der Spitze bzw. Probe ist. $[f_s(E_s, T_s) - f_p(E_p, T_p)]$ ist der Besetzungsunterschied zwischen den Elektronenzuständen der Spitze und der Probe. Die Deltadistribution $\delta(E_s - E_p)$ stellt sicher, dass nur elastische Tunnelprozesse betrachtet werden mit $E_s = E_p$. Dabei ist M_{sp} das Tunnelmatrixelement nach Bardeen zwischen den Zuständen ψ_s der Spitze und den Zuständen ψ_p der Probe [19]:

$$M_{sp} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int_S (\psi_s^* \nabla \psi_p - \psi_p \nabla \psi_s^*) dS. \quad (2.13)$$

m_e ist die Elektronenmasse und S eine beliebige Fläche innerhalb der Tunnelbarriere, die den Bereich der Spitze vom Bereich der Probe trennt (vgl. Bild 2.3). Da die Wellenfunktionen ψ_s und ψ_p mit ihren Eigenwerten E_s und E_p aus den ungestörten Hamiltonfunktionen der Tunnelspitze und der Probe herrühren, sind sie nicht zueinander orthogonal [20]. Beim STM werden die chemischen Potentiale μ_s der Spitze und μ_p der Probe durch den Tunnelspannungsterm eV_t voneinander getrennt. Tunnelt man mit einer Metallspitze auf einer Metallprobe, kann V_t sehr klein gewählt werden und man kann $\mu_s \approx \mu_p \approx \mu$ annehmen [20].

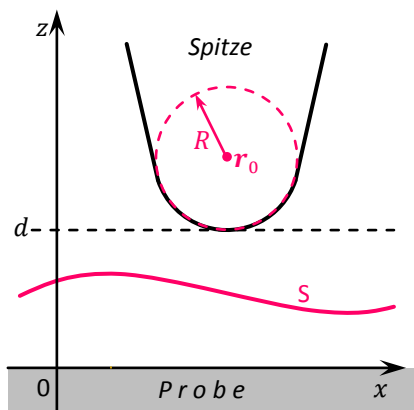


Bild 2.3 | Geometrie im Tersoff-Hamann-Modell. Die Tunnelspitze wird als Kugel mit Radius R betrachtet, die sich im Abstand d über der Probenoberfläche befindet. Zeichnung nach [18].

Außerdem gilt in Metallen auch bei Raumtemperatur $T \ll T_F = E_F/k_B$ und damit $\mu \approx E_F$. Zusammengenommen ergibt sich dann für den Tunnelstrom [18]

$$I_t = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 V_t \cdot \sum_{s,p} |M_{sp}|^2 \cdot \delta(E_p - E_F) \cdot \delta(E_s - E_F). \quad (2.14)$$

Zur Bestimmung des Tunnelmatrixelements M_{sp} muss die mathematische Form der Proben- und Spitzenwellenfunktion festgelegt werden. Für den Probenzustand nehmen Tersoff und Hamann Blochwellen an:

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{V_p}} \cdot \sum_G a_G \cdot e^{-\sqrt{\kappa^2 + |\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}|^2} \cdot z} \cdot e^{-i(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}. \quad (2.15)$$

V_p ist das Volumen der Probe, \mathbf{k}_{\parallel} ist der Wellenvektor parallel zur Oberfläche und \mathbf{G} der reziproke Gittervektor des Oberflächengitters mit den Entwicklungskoeffizienten a_G . \mathbf{r}_{\parallel} ist der zur Oberfläche parallele Ortsvektoranteil, z zeichnet die zur Oberfläche senkrechte Richtung aus und $\kappa = (2m_e\varphi)^{1/2}/\hbar$ ist die Abklingkonstante des Zustands in die Tunnelbarriere hinein mit φ als Austrittsarbeit der Probe. Die Austrittsarbeit und damit die Abklingkonstante in die Tunnelbarriere der Spitze sei die gleiche wie die der Probe. Für die als Kugel angenommene Tunnelspitze bietet sich als erste Näherung eine sphärische Wellenfunktion der Form [20]

$$\psi_s = \frac{c_s}{\sqrt{V_s}} \cdot \frac{R e^{-\kappa R}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \cdot e^{-\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \quad (2.16)$$

an. V_s ist das Volumen und \mathbf{r}_0 der Mittelpunkt der Kugel. c_s ist ein Normierungsfaktor, der durch die genaue geometrische und elektronische Struktur der Spitze und der Grenzfläche zwischen Barriere und Spitze bestimmt ist. Die Wellenfunktion ist unter der Annahme $R \gg \kappa$ mit $c_s \approx 1$ normiert. Das Tunnelmatrixelement dann [18]

$$M_{sp} = \frac{2\pi\hbar^2}{V_p m_e} \cdot R e^{\kappa R} \cdot \psi_p(\mathbf{r}_0). \quad (2.17)$$

Dies in Gleichung (2.14) eingesetzt ergibt für den Tunnelstrom

$$I_t = \frac{32\pi^3 e^2 \varphi^2 R^2}{\kappa^4 \hbar} D_s(E_F) e^{2\kappa R} \cdot V_t \cdot \underbrace{\sum_p |\psi_p(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E - E_F)}_{\text{Proben-LDOS: } D_p(E_F, \mathbf{r}_0)}. \quad (2.18)$$

D_s ist die Zustandsdichte (engl. *density of states*, DOS) der Spitze an der Fermienergie E_F . Die Summe ist die lokale Zustandsdichte (engl. *local density of states*, LDOS) $D_p(E_F, \mathbf{r}_0)$ der Probenoberfläche bei E_F , wie sie im Mittelpunkt \mathbf{r}_0 des Krümmungskreises des Tunnelspitzenapex erscheint. Wird mit konstantem Tunnelstrom die Probenoberfläche durch die Spitze abgerastert, wird als Topographie der Probe eine Fläche konstanter LDOS erfasst. Da $|\psi_p(\mathbf{r}_0)|^2 \sim e^{-2\kappa(R+d)}$, folgt aus Gleichung (2.18) für $I_t \sim e^{-2\kappa d}$. Dies entspricht dem unter ähnlichen Annahmen berechneten Verhalten des Tunnelkontakts nach Simmons in Glei-

chung (2.11). Die Ableitung dI_t/dV_t – kurz dI/dV oder differentieller Tunnelleitwert genannt – ist proportional zur Zustandsdichte D_p der Probe an der Fermienergie E_F . Für größere Tunnelspannungen V_t kann statt Gleichung (2.12) im infinitesimalen Grenzfall analog zu Bardeen [19], gekoppelt mit den Argumenten von Tersoff und Hamann ([18] und [20]), gemäß [21] und [22]

$$I_t \sim \int_{-\infty}^{+\infty} D_s(E - eV_t) D_p(E, \mathbf{r}_0) T(E) [f(E - eV_t, T_s) - f(E, T_p)] dE \quad (2.19)$$

geschrieben werden, wobei $T(E)$ die Tunnelwahrscheinlichkeit für die Tunnelbarriere ist (siehe Gleichung (2.1)). Bei niedrigen Temperaturen werden die Fermiverteilungen in Gleichung (2.19) zu Stufenfunktionen, wobei die Fermienergien von Spitze und Probe sich um eV_t unterscheiden. Nimmt man weiter an, dass die Zustandsdichte der Spitze energieunabhängig sei, folgt

$$I_t \sim \int_0^{eV_t} D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0) \cdot T(\epsilon, eV_t) d\epsilon \quad (2.20)$$

mit ϵ als Elektronenenergie relativ zur Fermienergie der Probe. Damit ergibt sich der differentielle Tunnelleitwert zu

$$\frac{dI}{dV} \sim e D_p(eV_t, \mathbf{r}_0) \cdot T(eV_t, eV_t) + e \int_0^{eV_t} D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0) \frac{dT(\epsilon, eV_t)}{d(eV_t)} d\epsilon. \quad (2.21)$$

Normiert man den differentiellen Tunnelleitwert dI/dV auf den Leitwert des Tunnelkontakts I_t/V_t , so ergibt sich

$$\frac{dI}{dV} \frac{V_t}{I_t} = \frac{D_p(eV_t, \mathbf{r}_0) + \int_0^{eV_t} \frac{D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0)}{T(eV_t, eV_t)} \cdot \frac{d}{d(eV_t)} T(\epsilon, eV_t) d\epsilon}{\underbrace{\frac{1}{eV_t} \cdot \int_0^{eV_t} D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0) \frac{T(\epsilon, eV_t)}{T(eV_t, eV_t)} d\epsilon}_N}. \quad (2.22)$$

Eine plausible Annahme ist [21], dass Verhältnisse von T in der Gleichung (2.22) den exponentiellen Charakter von T verschwinden lassen, sodass die Abhängigkeit vom Tunnelabstand und V_t nahezu aufgehoben ist. Dadurch wird der Nenner N nahezu konstant und wirkt wie eine Normierung von D_p . Hierdurch sind verschiedene Messungen leichter miteinander vergleichbar. Hinzu kommt noch ein mit V_t (für $V_t > 0$ langsam) variierender Hintergrund in Form des mit N normierten Integrals aus dem Zähler in Gleichung (2.22). Es folgt daher

$$\frac{dI/dV}{I_t/V_t} = \frac{D_p(eV_t, \mathbf{r}_0)}{N} + \text{Hintergrund}. \quad (2.23)$$

Für $V_t > 0$ sind D_p/N und der Hintergrund vergleichbar groß, für $V_t < 0$ überwiegt der Hintergrund [21]. Die spannungsabhängige Messung des differentiellen Tunnelleitwerts bzw. seines normierten Wertes wird als Rastertunnelspektroskopie bezeichnet (engl. *scanning tunneling spectroscopy*, kurz STS).

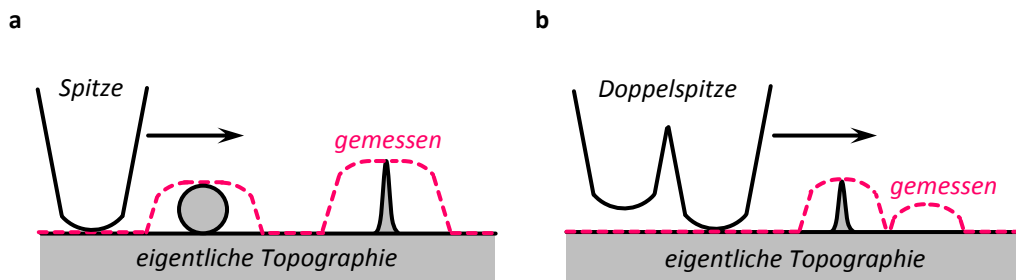


Bild 2.5| Einzel-und Doppelspitze. (a) Abbildung durch eine Einzelspitze. Alle Objekte werden verbreitert abgebildet. Dabei bilden Objekte, die schärfer als die Tunnelspitze sind, die Tunnelspitze ab. (b) Abbildung durch eine Doppelspitze. Die Doppelspitze erzeugt eine Dopplung von Bildelementen in der gemessenen Topographie. Zeichnung nach [25].

An Position A in Bild 2.4 bildet der Spitzenapex den zur Oberfläche nächsten Punkt und damit den Tunnelkontakt. Kommt die Spitze in die Nähe der Stufenkante (Position B), steht ein anderer Punkt auf dem Schaft der Tunnelspitze der Probe am nächsten und wird zum Tunnelkontakt. Rastert die Tunnelspitze weiter über die Stufenkante, so zieht die STM-Regelung die Tunnelspitze für einen konstanten Strom hoch und der Tunnelkontakt wandert von der Seite der Spitze zurück zum Spitzenapex (Position C). In der gemessenen Topographie wird daher zusätzlich zur eigentlichen Stufenkante die der Stufenkante zugewandte Tunnelspitzenseite abgebildet. Man könnte auch sagen, die Stufenkante ist spitzer als die Tunnelspitze und bildet diese ab [25]. Daher haben bei STM-Aufnahmen sehr spitze Adsorbate die gleiche Form, nämlich die Form der verwendeten Tunnelspitze (siehe auch Bild 2.5a). Je niedriger das abzubilden Objekt ist, desto weniger wird sein gemessenes Abbild verbreitert. Daher kann man im STM zum Beispiel die atomare Korrugation auf dichtgepackten Metalloberflächen messen (ca. 100 pm), ohne höhere Adsorbate (zum Beispiel 1 nm hoch) auf der Oberfläche getreu abzubilden [25].

Ein weiterer, sehr häufig vorkommender Abbildungsfehler ist die Dopplung von Bildobjekten durch eine Mehrfachspitze [25]. Dabei hat die Tunnelspitze mindestens zwei oder mehr Apizes. Rastert die Spitze über die Oberfläche, stehen bei ausreichend hohen Objekten die verschiedenen Apizes wechselnd im Tunnelkontakt. Hierdurch erscheinen die Objekte in der gemessenen Topographie gedoppelt (siehe auch Bild 2.5b).

Auch die an der Abbildung beteiligten Piezoelemente erzeugen Abbildungsfehler. Zum einen ist die Piezoausdehnung nicht linear zur angelegten Piezospannung, sondern es ergibt sich eine Hysterese (vgl. [24] und [25]). Hierdurch können Strukturen in der STM-Aufnahme verzerrt werden. Zum anderen erreicht das Piezoelement nach Anlegen einer Spannung seine volle Ausdehnung erst nach einer gewissen Zeit, d. h., es kriecht nach dem Anlegen der Spannung noch etwas nach. In STM-Aufnahmen macht sich dies durch eine Drift bemerkbar. Auch eine Temperaturveränderung von Probe oder Spitze führt zu einer Drift des Tunnelkontakts und damit zu einer Drift in der STM-Aufnahme.

2.2 Rastertunnelpotentiometrie (STP)

Die Rastertunnelpotentiometrie (engl. *scanning tunneling Potentiometry*, kurz STP) ist eine Abwandlung der STM-Technik, die 1986 durch P. Muralt und D. W. Pohl entwickelt wurde [26]. Die STP ermöglicht die gleichzeitige Erfassung der Probentopographie und des zugehörigen lokalen elektrischen Potentials mit der lateralen Auflösung eines STM.

2.2.1 Prinzip der STP

Für die STP wird über zwei Kontakte eine Querspannung V_{quer} angelegt, die in der Probe zu einem Stromfluss I_{quer} führt. Zwischen die Kontakte wird eine Tunnelspitze in Tunnelkontakt gesetzt und über ein Potentiometer mit den beiden Kontakten in der Art einer Brückenschaltung verbunden (siehe Bild 2.6). Die Querspannung V_{quer} fällt sowohl über die Probenoberfläche als auch über das Potentiometer ab. Man kann das Potentiometer daher so einstellen, dass die am Potentiometer für die Tunnelspitze abgegriffene Referenzspannung V_{ref} und die lokale Probenspannung V_{lok} unter der Tunnelspitze gleich sind. In diesem Fall verschwindet der Strom über die Tunnelspitze und die Brückenschaltung wird als abgeglichen bezeichnet. Bewegt man die Tunnelspitze über die Probenoberfläche, so verändert sich das lokale Probenpotential V_{lok} und die Brückenschaltung ist nicht mehr abgeglichen. Eine STP-Regelung gleicht die Veränderung des lokalen Potentials durch eine externe Spannung V_{ext} aus, bis die Brücke wieder abgeglichen ist, d. h., der Strom über die Tunnelspitze verschwindet und es gilt $V_{\text{ref}} = V_{\text{lok}} + V_{\text{ext}}$. Prinzipiell handelt es sich also bei der STP um eine stromlose Spannungsmessung mittels der Tunnelspitze, bei der parasitäre Widerstände wie der Tunnelwiderstand keine Rolle spielen.

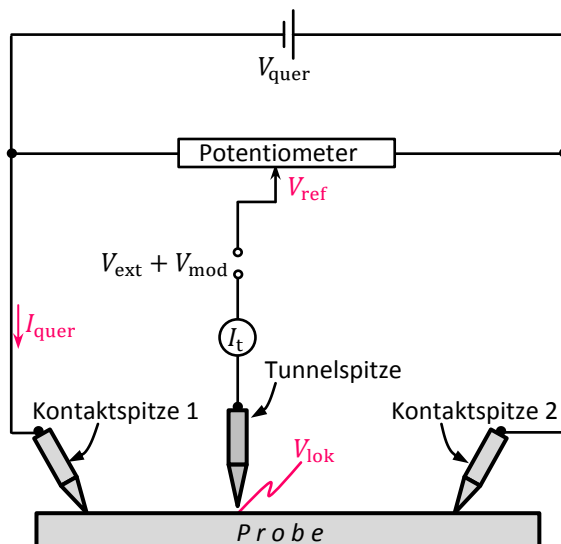


Bild 2.6 | Schema der STP. Bei der Tunnelpotentiometrie wird eine Querspannung V_{quer} über zwei Kontakte an die Probe angelegt, die über ein Potentiometer mit einer Tunnelspitze in der Art einer abgeglichenen Messbrücke verbunden sind. Als Tunnelspannung dient die Modulationsspannung V_{mod} . Rastert die Tunnelspitze über die Probe, wird die Brückenschaltung über die externe Spannung V_{ext} im Abgleich gehalten. Darstellung nach [27].

Da zur kontinuierlichen Abstandsregelung der Tunnelspitze dennoch ein Tunnelstrom nötig ist, legt man an den Tunnelkontakt eine Modulationsspannung V_{mod} an. Die STM-Regelung benutzt den Wechselstromanteil des Tunnelstroms für die Abstandsregelung. Die Regelung des Potentials benutzt den Gleichstromanteil des Tunnelstroms (zeitlichen Mittelwert des Tunnelstroms $\langle I_t \rangle$) und regelt diesen kontinuierlich für den Brückenabgleich zu Null ($\langle I_t \rangle = 0$). Daher erfasst die STP für jeden Rasterpunkt gleichzeitig die Höhenänderung der Tunnelspitze (topographische Information) und die für den Brückenabgleich benutzte externe Spannung (potentiometrische Information).

Damit die STM-Regelung und die STP-Regelung einander nicht stören, sollte die STP-Regelung etwa 10-mal langsamer arbeiten als die STM Regelung [28]. Da die STP-Regelung für das Erfassen des Strommittelwerts Zeit benötigt, sollte im STP-Betrieb die Scangeschwindigkeit der Tunnelspitze auf etwa $\frac{1}{3}$ des im STM-Betrieb üblichen Wertes gesenkt werden.

2.2.2 Elektronischer Transport und lokales Potential

Für das Verständnis der STP ist die Kenntnis des lokalen elektronischen Stromtransports essentiell. Das elementare Modell für den Elektronentransport ist das Modell nach P. Drude [29], das den diffusiven Elektronentransport in einem metallischen Leiter beschreibt. Dabei wird der Leiter als ein Gitter positiver Atomrümpfe aufgefasst, das von einem Elektronengas ausgefüllt wird. Legt man eine Spannung an den Leiter an, so werden die nahezu freien Elektronen im Leiter entlang des erzeugten elektrischen Feldes E beschleunigt, d. h.

$$m_e \dot{v} = -eE \quad (2.25)$$

mit m_e als Elektronenmasse, v als Elektronengeschwindigkeit und $-e$ als Elektronenladung. Weiter nimmt Drude an, dass sich die Elektronen an den Atomrümpfen stoßen und Energie verlieren. Dabei sei die Zeit τ zwischen zwei Stößen gegeben durch

$$\tau = \frac{\lambda}{v} \quad (2.26)$$

mit λ als freier Weglänge (engl. *mean free path*, MFP) der Elektronen. Die Integration von Gleichung (2.25) ergibt als Geschwindigkeit der Elektronen nach der Stoßzeit τ

$$v = -\frac{eE\tau}{m_e} + v_{\text{th}}. \quad (2.27)$$

v_{th} ist die rein thermische Geschwindigkeit der Elektronen, die ungerichtet und unabhängig von E ist. Man nennt die Differenz $v - v_{\text{th}}$ die Driftgeschwindigkeit v_d der Elektronen in Folge der Beschleunigung durch das elektrische Feld E ,

$$v_d = -\frac{\tau e E}{m_e} = -\mu E. \quad (2.28)$$

Dabei bezeichnet μ die sogenannte Beweglichkeit der Elektronen. Sei N die Zahl der Leitungselektronen und l die Durchquerungslänge, die sie in der Zeit t zurücklegen. Dann ergibt sich aus der Definition der Stromdichte j als Elektronenstrom $I = -eN/t$ je Querschnittsfläche A

$$j = \frac{I}{A} = \frac{-eN/t}{A} = -e \frac{N}{A} \frac{l}{t} = -env_d. \quad (2.29)$$

Dabei ist n die Elektronendichte. Es ergibt sich aus Gleichung (2.29) mit Gleichung (2.28) und der Leitfähigkeit $\sigma = e\mu n$ des Leiters das Ohmsche Gesetz

$$j = \sigma \cdot E. \quad (2.30)$$

Zwar gibt das Drude-Modell die richtigen Verhaltenstendenzen des Stromtransports wieder, aber es zeigen sich auch starke Diskrepanzen [30]. Bei der MFP erwartet man gemäß dem Drude-Modell Werte im Bereich typischer Gitterabstände von 100–500 pm, allerdings liegen die realen Werte bei Raumtemperatur um etwa zwei Größenordnungen höher. Zudem beinhaltet das Drude-Modell keinerlei Berücksichtigung der Quantenmechanik. Quantenmechanisch nimmt man statt eines einfachen, klassischen Elektronengases die Elektronen in Form von Blochwellen an, die mit dem Gitter periodisch sind und *stationäre* Elektronenzustände bilden. Stationäre Zustände beschreiben eine zeitunabhängige, d. h. eine ungestörte Ausbreitung von Elektronen. Am idealen Gitter kann also keine Streuung stattfinden. Damit die Blochwellen gestört werden können, muss das Gitter entweder Defekte (z. B. Versetzungen, Lücken oder Fremdatome) aufweisen oder schwingen (Phononenstreuung). Zwar können auch Elektronen untereinander stoßen, jedoch ist dies bei Temperaturen $T \ll T_F$ im Vergleich zu Stößen an Defekten und Phononen deutlich unwahrscheinlicher. Dennoch hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse des Drudemodells aus Gleichung (2.28) sich formal auch im Rahmen einer streng quantenmechanischen Rechnung ergeben [30].

Im Folgenden werden daher das Drude-Modell erweiternde Aspekte des quantenmechanischen Elektronentransports erläutert. Die Ausführungen folgen einem Buch von S. Datta [31]. Die Elektronen als Wellen im Kristall werden durch ihren Wellenvektor \mathbf{k} und ihre Energieeigenwerte E bestimmt, wobei diese Werte durch die normalerweise große Zahl an Kristallatomen im Leiter quasikontinuierlich und nicht diskret sind. Weiterhin wird durch die Kristallstruktur auch die Energiedispersion $E(\mathbf{k})$ in Form von elektronischen Bändern für die Elektronen vorgegeben, jedoch reicht im Folgenden für das prinzipielle Verständnis die Annahme eines quasifreien Elektronengases bei 0 K aus. Die Energiedispersion des quasifreien Elektronengases ist durch

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \mathbf{k}^2 \quad (2.31)$$

gegeben, mit m^* als effektive Masse der Elektronen im Kristall. Da die Elektronen als gebundene Teilchen im Kristall dem Pauli-Prinzip unterliegen, können nicht mehr als zwei Elektronen (mit verschiedenen Spin) einen gemeinsamen Zustand – d. h. einen einzelnen Vektor \mathbf{k} – besetzen.

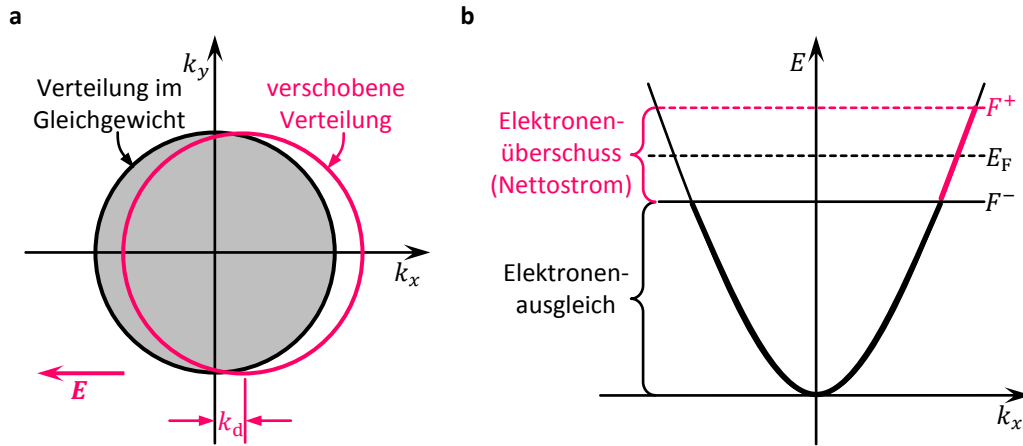


Bild 2.7 | Mikroskopischer Elektronentransport. (a) Schnitt im k -Raum in der k_x - k_y -Ebene durch die Fermikugel des idealen Elektronengases im Gleichgewicht (grau). (b) Energiedispersion des idealen Elektronengases entlang der k_x -Achse. Durch ein äußeres Feld E wird die Fermikugel im k -Raum um den Vektor k_d gegen die Richtung des elektrischen Feldes (hier die k_x -Achse) verschoben (a) und die Fermienergie der Elektronen entlang der Feldrichtung wird in zwei Quasi-Ferminiveaus F^+ und F^- aufgespalten (b). Darstellungen nach [31].

Daher werden die möglichen Elektronenzustände bis zur einer Maximalenergie – der Fermienergie E_F – vollständig besetzt. Der Fermienergie kann dabei ein maximaler Wellenvektor $k_F = (2m^* E_F / \hbar^2)^{1/2}$ der Elektronen zugeordnet werden. Gleichung (2.31) entspricht in seiner Form einer Kugelgleichung für den k -Raum, d. h., die besetzten Zustände liegen *im Gleichgewicht* innerhalb der sogenannten Fermikugel (grau gefüllter Kreis in Bild 2.7a, Radius k_F) und energetisch unterhalb der Fermienergie E_F (siehe Bild 2.7b).

Legt man nun von außen ein elektrisches Feld an (in Bild 2.7 in Richtung $-k_x$), so werden die Elektronen entlang dieser Richtung beschleunigt, wobei der resultierende Driftvektor durch Stöße – wie im Drudemodell erläutert – in seiner Größe limitiert wird. Aus Gleichung (2.28) ergibt sich mit der de-Broglie-Beziehung $\mathbf{p} = m^* \mathbf{v} = \hbar \mathbf{k}$ für den Driftvektor der Elektronen

$$\mathbf{k}_d = \frac{m^*}{\hbar} \mathbf{v}_d = -\frac{\tau e \mathbf{E}}{\hbar}, \quad (2.32)$$

der die gesamte Fermikugel im k -Raum entsprechend um den Betrag k_d entgegen dem elektrischen Feld verschiebt (in $+k_x$ -Richtung in Bild 2.7a). Dabei werden durch die Verschiebung um k_d Elektronen innerhalb der Energieparabel auf eine höhere Energie gedrängt, während in Richtung $-k_x$ die Elektronen in tiefere Energiezustände gehen. Bei typischen Feldstärken von etwa 10 V/cm gilt $k_d \ll k_F$, sodass die Veränderung durch das elektrische Feld vor allem in einem schmalen Bereich um $k_x = \pm k_F$ am Rand der Fermikugel stattfindet. Daher kann man statt von einer Driftbewegung aller Elektronen von einer Bewegung eines Bruchteils der Elektronen von $k_x = -k_F$ nach $k_x = +k_F$ sprechen, d. h., der Stromtransport wird vor allem durch Elektronen nahe der Fermienergie getragen (siehe hierzu Bild 2.7b).

Man kann diesen Zusammenhang durch Umschreiben der Stromdichte aus Gleichung (2.29) mit dem Drudemodell verbinden:

$$j = -e \cdot n \frac{v_d}{v_F} \cdot v_F. \quad (2.33)$$

Der Strom wird also durch den kleinen Anteil aller Elektronen $n \cdot v_d/v_F$ mit der Geschwindigkeit $v_F = \hbar k_F/m^*$ getragen (Leitungselektronen).

Anhand der in Bild 2.7b gezeigten Energiedispersion erkennt man, dass im Fall eines äußeren elektrischen Feldes die Fermienergie als Gleichgewichtsgröße verloren geht. Stattdessen finden sich ein absolutes Minimum bei $k_x = -k_F + k_d$ (in Bild 2.7b als F^- bezeichnet) und ein absolutes Maximum bei $k_x = +k_F + k_d$ (in Bild 2.7b als F^+ bezeichnet) für die besetzten Elektronenzustände am Rand der Fermikugel. Dabei stellen F^- bzw. F^+ für den Elektronentransport entlang bzw. entgegen dem äußeren elektrischen Feld die Energieextrema dar und werden daher analog zum Gleichgewichtsfall als Quasi-Ferminiveaus bezeichnet. Es bildet sich also im Transportfall, bei dem eigentlich kein Gleichgewicht mehr durch ein Fermienergie definiert wird, ein *Quasigleichgewicht* aus. Für ein ideales Elektronengas lassen sich F^+ und F^- durch

$$F^+ \approx \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_F + k_d)^2 \quad \text{und} \quad F^- \approx \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_F - k_d)^2 \quad (2.34)$$

abschätzen. Im Energiebereich $F^+ - F^-$ liegen die Elektronenzustände, die zum Nettotunnelstrom beitragen. Es ergibt sich für die Aufspaltung der Quasi-Ferminiveaus mit Gleichung (2.32) und $k_F = m^* v_F / \hbar$

$$F^+ - F^- \approx \frac{2\hbar^2}{m^*} k_F k_d = 2eE v_F \tau = 2eE \lambda. \quad (2.35)$$

Die Aufspaltung ist proportional zur Energie, die die Leitungselektronen im äußeren elektrischen Feld E entlang der MFP $\lambda = v_F \tau$ erhalten, wobei die MFP nicht wie im Drudemodell als Abstand der Gitteratome zueinander aufgefasst wird, sondern durch Gleichung (2.35) festgelegt wird. Die Energiedissipation durch Phononen (Gitterstöße im Drudemodell) ist quantenmechanisch *nicht am Gitter lokalisiert*, sondern durch die Materialkonstante λ charakterisiert. Die Energiedissipation findet also im gesamten Leiter gleichmäßig verteilt statt. Durch die Aufspaltung der Fermienergie E_F bzw. bei höheren Temperaturen des chemischen Potentials μ zu Quasiniveaus verlieren E_F bzw. μ ihre Bedeutung als Gleichgewichtsgrößen im Transportfall. An ihre Stelle treten im stationären Transportfall (Quasi-Gleichgewicht) *lokal* offensichtlich die Quasi-Ferminiveaus, und dies über den gesamten Leiter verteilt. Man begegnet diesem Umstand, indem man die ursprünglichen Gleichgewichtsgrößen (z.B. μ) um die im Transportfall hinzukommende elektrische Energie $-e\phi$ der Elektronen erweitert:

$$\mu_{ec} = \mu - e\phi(x, y). \quad (2.36)$$

μ_{ec} wird als elektrochemisches Potential bezeichnet und bildet lokal den Mittelwert der Quasi-Ferminiveaus F^+ und F^- . $\phi(x, y)$ ist das lokale elektrostatische Potential auf der Probenoberfläche, das mathematisch über $E = -\nabla\phi$ mit dem

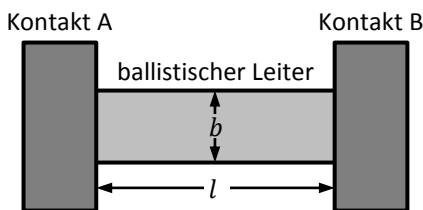
lokalen elektrischen Feld E verbunden ist. Offensichtlich zeigt sich die rein phononische Streuung (diffusiver Transportfall, siehe Gleichung (2.35)) lokal auf der Oberfläche einfach als Gradient von μ_{ec} in Form des elektrischen Feldes E .

Neben dem diffusiven Transportfall kann auch der ballistische Transportfall auftreten, bei dem die Streuung keine Rolle spielt (d. h. es findet keine Energiedissipation im Leiter statt). Dies ist z. B. der Fall, wenn die Dimensionen des Leiters deutlich kürzer als die MFP λ werden. Im Folgenden werden die Transportverhältnisse anhand eines ballistischen 2D-Leiters bei tiefen Temperaturen gemäß [31] erläutert (siehe Bild 2.8): Ein ballistischer Leiter mit der Breite b und Länge l werde zwischen zwei Kontakten (Elektronenreservoirs) festgeklemmt, an denen Elektronen nicht reflektiert werden können. Die chemischen Potentiale $\mu_{A,B}$ der Kontakte werden durch eine äußere Spannung $(\mu_A - \mu_B)/e$ energetisch voneinander getrennt und der Leitwert G_b des ballistischen Leiters ist durch

$$G_b = \frac{2e^2}{h} M \quad (2.37)$$

gegeben [31]. Dabei ist M die Zahl der durch die begrenzte Breite b des Leiters quantisierten Transversalmoden. Auffällig ist, dass der Leitwert unabhängig von der Länge des ballistischen Leiters ist. Für die Betrachtung des elektrochemischen Potentials kann man zunächst analog zum diffusiven Transport die Elektronenzustände nach ihrem k -Vektor in und entgegen der Transportrichtung (x -Achse) unterscheiden (siehe Bild 2.7b): nämlich in $+k_x$ - und $-k_x$ -Zustände.

a



b

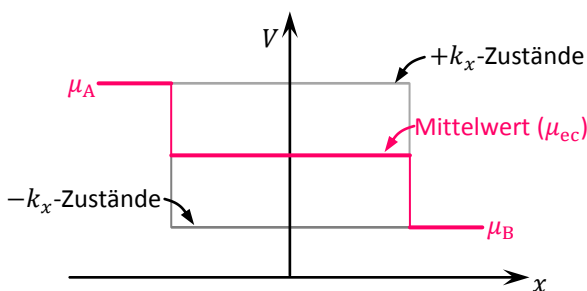


Bild 2.8| Ballistischer Elektronentransport. (a) Ballistischer Leiter der Breite b und Länge l zwischen zwei Kontakten A und B. (b) Energieverlauf E zwischen den Kontakten. Im ballistischen Leiter ist das mittlere Quasi-Ferminiveau konstant und zeigt nur an den Kontaktflächen jeweils einen Sprung (Kontaktwiderstand). Darstellung nach [31].

Vorgegeben war, dass beim Übergang zum ballistischen Leiter keine Reflexion stattfindet und dass es im ballistischen Leiter keine Energiedissipation gebe. Der ballistische Leiter kann sich also zwischen den beiden chemischen Potentialen μ_A und μ_B der beiden Kontakte energetisch nur derart bewegen, dass das Quasi-Ferminiveau F^+ der $+k_x$ -Zustände gleich μ_A und das Quasi-Ferminiveau F^- der $-k_x$ -Zustände gleich μ_B ist (siehe Bild 2.8b).

Bedingt durch die geringe Zahl an Transversalmoden M bleibt die Aufspaltung im ballistischen Leiter über die Länge des Leiters konstant und richtet sich nach den äußeren Potentialen μ_A und μ_B . Das chemische Potential μ_{ec} des ballistischen Leiters liegt mittig zwischen μ_A und μ_B und bleibt über die gesamte Länge des ballistischen Leiters ebenfalls konstant. An beiden Kontaktflächen gibt es einen gleichen Potentialsprung, d. h., der Leitwert G_b des ballistischen Leiters wird nur durch die Widerstände an den Kontaktflächen begrenzt und der Stromtransport erfolgt im Energiebereich $\mu_A - \mu_B$. Wie schon Gleichung (2.36) vermuten ließ, folgt das elektrische Potential ϕ im ballistischen Leiter seinem elektrochemischen Potential μ_{ec} . Bei abrupten Sprüngen von μ_{ec} an den Kontaktflächen kann ϕ jedoch nicht in gleicher Art abrupt folgen, sondern der Sprung von ϕ wird über die sogenannte Abschirmlänge ausgeschmiert [31]. Sie beträgt in Halbleitern einige Nanometer und in Metallen einige zehn Pikometer.

Wenn lokale Streuer im ballistischen Leiter auftreten, wird der Leitwert G des ballistischen Leiters kleiner (Gleichung (2.37)). Diesen Umstand kann man durch Einführung eines zusätzlichen Faktors in Form einer Transmissionswahrscheinlichkeit T der Leitungselektronen abbilden. Man erhält dann für den Leitwert des ballistischen Leiters G die sogenannte Landauer-Formel [31]

$$G = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (2.38)$$

$T = 1$ (maximale Transmission) stellt den Fall eines rein ballistischen Leiters dar. Mit $1/G$ als Widerstand des Leiters kann man den Leitwert umschreiben:

$$\frac{1}{G} = \frac{h}{2e^2 MT} = \frac{h}{2e^2 M} + \frac{h}{2e^2 M} \frac{1-T}{T} = \frac{1}{G_b} + \frac{1}{G_s}. \quad (2.39)$$

Offensichtlich wird die *Mathiessenregel* erfüllt, d. h. der Widerstand $1/G$ des Leiters setzt sich aus dem Kontaktwiderstand des ballistischen Leiters $1/G_b$ und dem Widerstand des Streuers $1/G_s$ zusammen, die beide voneinander unabhängig sein müssen (Bedingung der Mathiessenregel).

Analog zum rein ballistischen Leiter kann man sich die Energieverteilung der Elektronen im Leiter ansehen (siehe Bild 2.9), wobei wieder die Elektronen hinsichtlich ihrer Richtung in die Transportrichtung ($+k_x$ -Zustände) oder gegen die Transportrichtung ($-k_x$ -Zustände) unterteilt werden. Die Kontakte seien wieder ohne Reflexion (ansonsten hätten man kaskadenartig das, was nachfolgend am Streuer betrachtet wird). Des Weiteren werden Interferenzeffekte durch die Streuung nicht beachtet und die Elektronen als semiklassische Teilchen behandelt. Treffen die Elektronen im ballistischen Leiter auf den Streuer, so wird ein Anteil $(1 - T)$ reflektiert und ein Anteil T transmittiert (Bild 2.9a).

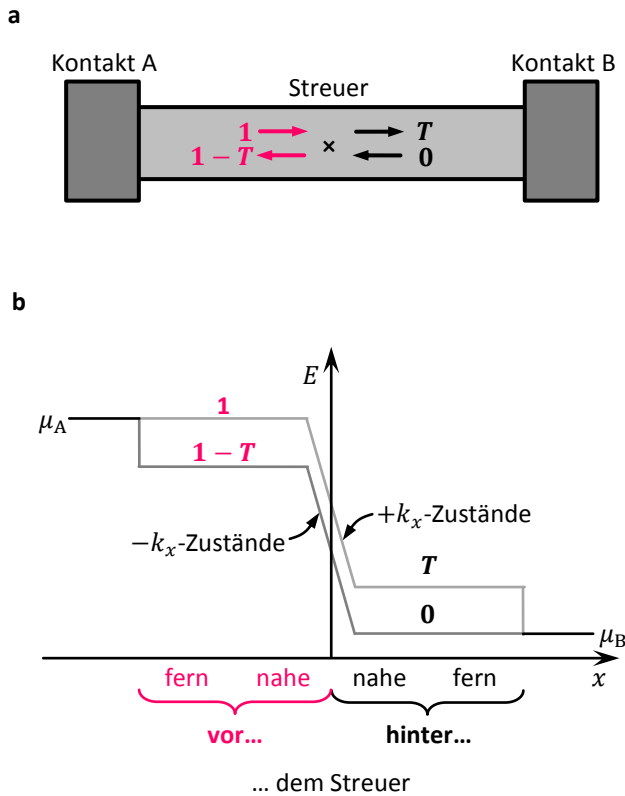


Bild 2.9| Elektronentransport in Anwesenheit eines Streuers. (a) Streuer im ballistischen Leiter, der teilweise Leitungselektronen reflektiert. (b) Energieverlauf E im Leiter. Der Streuer bewirkt einen Sprung in den Quasi-Fermi-Niveaus der Elektronen. Bild nach [31].

Im Vergleich zum rein ballistischen Leiter (Bild 2.8b) variiert der räumliche Verlauf der beiden Quasi-Fermi-Niveaus: Wie beim ballistischen Leiter liegt vor dem Streuer das Quasi-Fermi-Niveau F^+ für die $+k_x$ -Zustände bei $F^+ = \mu_A$. Da nur ein Teil T der Elektronen mit $+k_x$ -Vektor den Streuer passieren kann, liegt F^+ hinter dem Streuer niedriger und hat den Wert $F^+ = \mu_B + T(\mu_A - \mu_B)$. Das Quasi-Fermi-Niveau F^- für die $-k_x$ -Zustände liegt hinter dem Streuer wie beim rein ballistischen Leiter bei $F^- = \mu_B$. Vor dem Streuer wird die Zahl der besetzten $-k_x$ -Zustände durch die vom Streuer reflektierten Elektronen (aus $+k_x$ wird $-k_x$ bei der Reflexion) erhöht, sodass das Quasi-Fermi-Niveau der $-k_x$ -Zustände $F^- = \mu_B + (1 - T)(\mu_A - \mu_B)$ beträgt.

Sehr nahe am Streuer wird die Fermi-Verteilung in den $-k_x$ - und $+k_x$ -Zuständen stark durch die Teilreflexion am Streuer gestört, sodass sich F^- und F^+ rasch in der Nähe des Streuers ändern. Hierdurch hat man eine hochgradige Nichtgleichgewichtsverteilung lokal am Streuer vorliegen, die fern des Streuers durch Relaxationsprozesse zügig wieder in ein Quasigleichgewicht geführt wird, wobei Datta [31] zur Vereinfachung keinen Transfer von Elektronen zwischen $-k_x$ - und $+k_x$ -Zuständen annimmt. Streng genommen hat man am Streuer durch den schnellen Potentialabfall $(1 - T)(\mu_A - \mu_B)$ heiße Elektronen vorliegen, sodass man eigentlich keine Quasi-Fermi-Niveaus mehr definieren kann. Die Energiedissipation geschieht nicht abrupt am Streuer, sondern im Rahmen einer durch die Relaxationsvorgänge bedingten größeren Länge um den Streuer herum [31]. Der Rest der Spannung $T(\mu_A - \mu_B)$ fällt an den Kontakten ab (siehe auch Bild 2.9b).

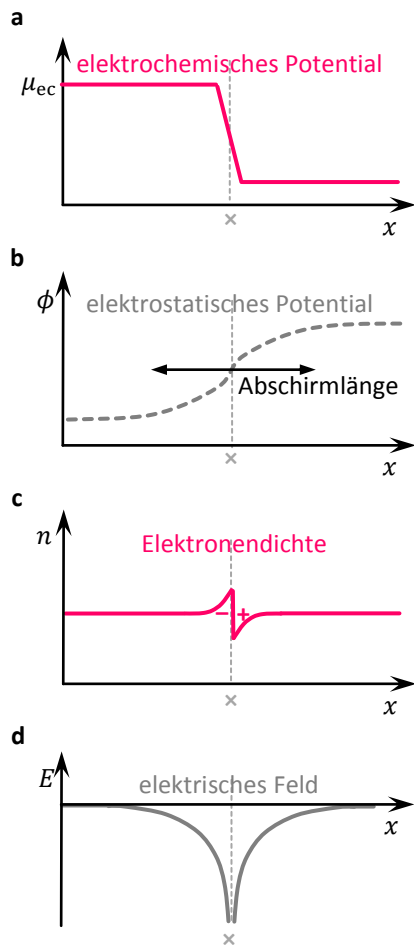


Bild 2.10 | Transportverhalten am Streuer. (a) Verlauf des elektrochemischen Potentials μ_{ec} am Streuer (x). Der Streuer bewirkt einen Sprung in μ_{ec} . (b) Elektrostatisches Potential ϕ im Leiter. ϕ zeigt einen ausgeschmierten Sprung am Streuer. (c) Elektronendichte n im Leiter. n variiert um die Streuerposition und bildet einen sogenannten Landauer-Widerstandsdipol aus. (d) Elektrisches Feld E im Leiter. Der Streuer bildet um sich herum ein zusätzliches elektrisches Feld aus. Darstellung nach [31].

Bild 2.10 zeigt das Transportverhalten am Streuer im Detail: Der Streuer erzeugt im elektrochemischen Potential μ_{ec} (Bild 2.10a) einen Sprung. Das elektrostatische Potential ϕ folgt dem Sprung von μ_{ec} nicht direkt, sondern ist um die Abschirmlänge ausgeschmiert (Bild 2.10b). Eine abrupte Änderung von ϕ hat gemäß $E = -\nabla\phi$ ein zusätzliches elektrisches Feld E (Bild 2.10d) an der Position des Streuers und damit ein Ladungsungleichgewicht zur Folge. Dieses Ladungsungleichgewicht zeigt sich in der Elektronendichte im Leiter (Bild 2.10c) in Form eines Ladungsdipols, dem sogenannten Landauer-Widerstandsdipol: Vor dem Streuer wird in Folge der Elektronenreflexion die Elektronendichte höher (negative Überschussladung), während sie hinter dem Streuer wegen der eingeschränkten Transmission durch den Streuer erniedrigt wird (positive Überschussladung), wobei der Wirkungsbereich durch die Abschirmlänge im ballistischen Leiter begrenzt wird.

Liegt im Leiter diffusiver statt ballistischer Transport vor, werden die Verhältnisse am Streuer ähnlich sein: Wegen der beschränkten Elektronentransmission findet ein abrupter Sprung des elektrochemischen Potentials μ_{ec} statt. μ_{ec} selbst ist vor und hinter dem Streuer nicht konstant, sondern zeigt wegen des diffusiven Elektronentransports einen Gradienten. Die Energiedissipation geschieht dabei vor allem über Phononenstreuung in der Nähe des Streuers.

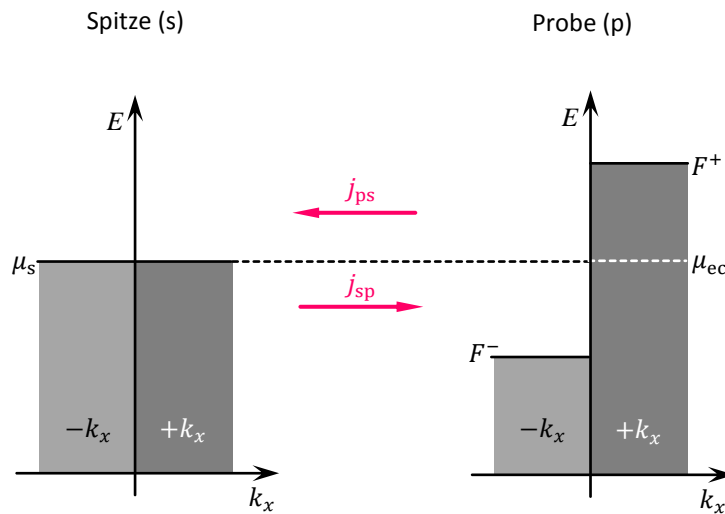


Bild 2.11 | Tunneln in der STP. Bei der STP verschwindet (im zeitlichen Mittel) der Tunnelstrom und damit die Tunnelspannung, d. h., es findet kein Ladungstransfer statt. Dies ist der Fall, wenn das chemische Potential der Spitze μ_s und das elektrochemische Potential der Probe μ_{ec} gleich hoch sind. Wegen der unterschiedlichen Energie zwischen hinaus- und hineintunnelnden Elektronen ist jedoch ein Energietransfer möglich. Zeichnung nach [32].

Was erfasst die Tunnelpotentiometrie nun als lokales Potential V_{lok} während der Messung? Hierfür kann man sich gemäß J. Homoth [32] die energetischen Verhältnisse beim Tunnelprozess ansehen. Man betrachtet analog zu Simmons (vgl. Bild 2.2) den Tunnelprozess zwischen Spitze und Probe, wobei hier die Zustände der Elektronen im k -Raum in und gegen die Transportrichtung unterschieden werden, d. h. in $+k_x$ - und $-k_x$ -Zustände (siehe auch Bild 2.11). Bei der STP muss der Tunnelstrom (im zeitlichen Mittel) verschwinden, d. h., der Strom der in die Probe hineintunnelnden Elektronen j_{sp} und der Strom der aus der Probe kommenden Elektronen j_{ps} ist gleich. Im zeitlichen Mittel findet kein Nettotransport von Elektronen zwischen Spitze und Probe statt und es fällt zwischen ihnen keine Spannung ab. Es kann jedoch aufgrund der unterschiedlichen Energie der aus der Spitze und aus der Probe tunnelnden Elektronen zu einem Energietransfer zwischen Probe und Spitze kommen (siehe Bild 2.11).

Wegen des fehlenden Elektronentransports innerhalb der Spitze sind die $+k_x$ - und $-k_x$ -Zustände bis zum gleichen „Quasi-Ferminiveau“ besetzt, nämlich dem chemischen Potential μ_s der Spitze. In der Probe sind durch den vorhandenen Elektronentransport bedingt die $+k_x$ - und $-k_x$ -Zustände bis zu den verschiedenen Quasi-Ferminiveaus F^+ und F^- gefüllt. Liegt der Mittelwert von F^+ und F^- – das elektrochemische Potential μ_{ec} der Probe – mit dem chemischen Potential μ_s der Spitze gleichauf, ist das Kriterium eines verschwindenden Nettotunnelstroms für die STP erfüllt. Während des Rasterns variiert μ_{ec} lateral auf der Probe und die STP-Regelung hält μ_s über die externe Spannung V_{ext} an jedem Rasterpunkt auf dem Niveau von μ_{ec} . Die STP erfasst also als lokales Potential das elektrochemische Potential der Probenoberfläche.

2.2.3 Thermospannung

Bei STP-Messungen können neben dem eigentlichen elektrochemischen Potential μ_{ec} infolge des Elektronentransports auf der Oberfläche zusätzlich auch sogenannte Thermospannungssignale auftreten. Wie der Name schon andeutet, sind diese Signale Folge eines Temperaturunterschieds zwischen Tunnelspitze und Probe, z. B. durch die Energiedissipation beim Elektronentransport oder durch einen anderen, der Messanlage inhärenten Prozess. Die Thermospannung in einem Tunnelkontakt wurde zuerst durch C. Leavens und G. C. Aers [33] 1987 beschrieben, wobei hier einer Erläuterung von J. A. Støvneng und P. Lipavský [34] gefolgt wird. Hierfür setzt man in Gleichung (2.19) die Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E)$ als einen konstanten Faktor fest und zieht sie vor das Integral, wo sie mit weiteren möglichen Vorfaktoren zu einem Proportionalitätsfaktor α zusammengefasst wird. Es folgt für den Tunnelstrom nach Gleichung (2.19)

$$I_t = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} D_s(\epsilon + \frac{1}{2}eV_{th}) \cdot D_p(\epsilon - \frac{1}{2}eV_{th}, \mathbf{r}_0) \times [f(\epsilon - \frac{1}{2}eV_{th}, T_p) - f(\epsilon + \frac{1}{2}eV_{th}, T_s)] d\epsilon \quad (2.40)$$

mit D_s und D_p als die (normierten) Zustandsdichten und T_s und T_p als die Temperaturen von Spitze (s) und Probe (p). \mathbf{r}_0 bezeichnet den Ortsvektor des Mittelpunkts der Krümmungskugel im Spitzenapex. f ist die Fermiverteilung in Spitze und Probe, wobei zur Vereinfachung das chemische Potential μ mittig zwischen dem chemischen Potential μ_s der Spitze und dem (elektro)chemischen Potential μ_p der Probe und damit genau in der Mitte der Thermospannung V_{th} liege (siehe Bild 2.12). Dabei sei $\epsilon = \mu - E$ die Elektronenergie relativ zum mittleren chemischen Potential μ . Man entwickelt nun Gleichung (2.40) für kleine V_{th} bis zur ersten Ordnung und erhält als Tunnelstrom $I_t = I_{th} + \sigma_t V_{th}$ mit dem Thermostrom $I_{th} = \alpha \int D_s(\epsilon) D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0) [f(\epsilon, T_p) - f(\epsilon, T_s)] d\epsilon$ und der Leitfähigkeit des Tunnelkontakts $\sigma_t = -e\alpha/2 \int D_s(\epsilon) D_p(\epsilon, \mathbf{r}_0) [f'(\epsilon, T_p) + f'(\epsilon, T_s)] d\epsilon$.

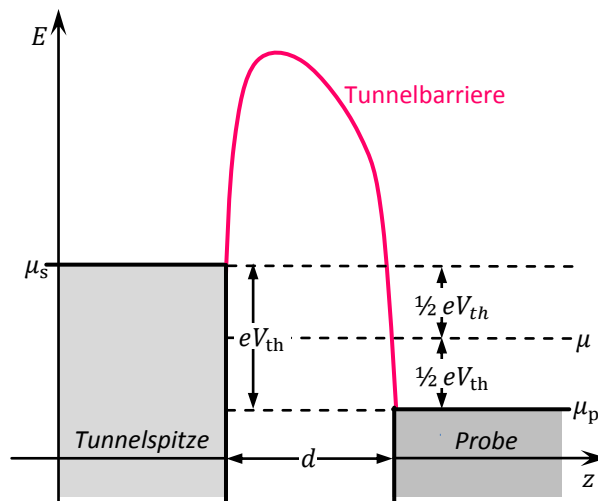


Bild 2.12 | Thermospannungsbe-rechnung nach Støvneng und P. Lipavský. Skizze zur Veranschaulichung der Verhältnisse bei der Berechnung der Thermospannung V_{th} im Tunnelkontakt. Zeichnung analog zu Bild 2.2.

Misst man die Thermospannung stromlos wie bei der STP, muss der Tunnelstrom I_t verschwinden, sodass sich der Thermostrom I_{th} und der im Tunnelkontakt über die Thermospannung getriebene Strom $\sigma_t V_{th}$ einander aufheben.

Nimmt man weiter an, dass die Zustandsdichten sich nur wenig mit der Energie im Bereich der thermischen Verschmierung $k_B T$ (k_B = Boltzmannkonstante) des chemischen Potentials ändern, kann man sie ebenfalls nach der Energie in erster Ordnung entwickeln. Nimmt man noch zusätzlich an, dass die Zustandsdichte der Probe wie bereits bei Tersoff und Hamann angenommen mit dem Faktor $e^{-2\kappa d}$ abklingt (d = Tunnelabstand, κ = Abklingkonstante in der Tunnelbarriere), folgt gemäß Støvneng und Lipavský [34] für die Thermospannung

$$V_{th} = \frac{\pi k_B^2}{6e} (T_s^2 - T_p^2) \cdot \left(\frac{D'_s(E)}{D_s(E)} \Big|_{E=\mu} + \frac{D'_p(\mathbf{r}_0, E)}{D_p(\mathbf{r}_0, E)} \Big|_{E=\mu} + \frac{d}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e}{\varphi}} \right). \quad (2.41)$$

Hierbei ist e die Elementarladung, m_e ist die Elektronenmasse, \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und φ die mittlere Austrittsarbeit zwischen Spitze und Probe. Der erste Faktor zeigt die Abhängigkeit der Thermospannung von der Differenz der Quadrate von Spitzen- (T_s) und Probertemperatur (T_p). Ausgeschrieben ergibt sich für den ersten Faktor $(T_s^2 - T_p^2) = (T_s - T_p) \cdot (T_s + T_p) = \Delta T \cdot 2T_m$ mit ΔT als Temperaturdifferenz und T_m als mittlere Temperatur im Tunnelkontakt. Der zweite Faktor besteht aus drei Summanden:

- Der erste Summand zeigt, dass die Thermospannung V_{th} von der normierten Ableitung der Zustandsdichte $D_s(E)$ der Spitze am mittleren chemischen Potential μ des Tunnelkontakts abhängt. Wenn sich D_s während der STP-Messung nicht verändert, bleibt der Summand konstant.
- Der zweite Summand zeigt, dass die Thermospannung V_{th} auch von der normierten Ableitung der LDOS der Probe $D_p(E)$ bei μ abhängt. Da hierbei in D_p und seiner Ableitung auch die Position der Tunnelspitze \mathbf{r}_0 eine Rolle spielt, können laterale Veränderungen von D_p und D'_p den Wert des zweiten Summanden und damit V_{th} beeinflussen. Ein Beispiel für eine solche Änderung sind Thermospannungssignale an Stufenkanten, wie sie Hoffmann et al. beobachtet haben [35].
- Der dritte Summand zeigt, dass die Thermospannung V_{th} auch vom Tunnelabstand d abhängt. Wird der Tunnelabstand konstant gehalten und ändert sich die Tunnelleitfähigkeit lateral nur wenig, kann man den dritten Summand als konstant annehmen.

Um bei einem STP-Experiment Thermospannungssignale vom elektrochemischen Potential zu unterscheiden, wechselt man einfach die Polarität der Querspannung. Das elektrochemische Potential ändert ebenfalls seine Polarität, da es aus der Querspannung bzw. dem Stromtransport resultiert. Die Thermospannung reagiert nicht, da ihr Vorzeichen nur durch das Vorzeichen der Differenz der Temperaturquadrate zwischen Spitze und Probe bestimmt wird.

2.2.4 Artefakte in der STP

Im Rahmen der Aufzeichnung des elektrochemischen Potentials μ_{ec} bei der STP kann es zur Ausbildung von Artefakten durch die Tunnelspitze kommen [36]. Neben Problemen bei der Potentialerfassung durch asymmetrische oder sehr flache I - V -Charakteristiken des Tunnelkontakts spielt auch die Form der Tunnelspitze eine Rolle. In der Nähe hoher Objekte (z. B. Stufenkanten auf der Oberfläche) kann die Tunnelspitze μ_{ec} nicht vollständig erfassen, da sie aufgrund ihrer eigenen Ausdehnung nicht beliebig nahe an die Oberfläche vor diesen Objekten kommt (siehe auch Bild 2.4). Dabei wechselt sie im Abstand ihrer halben Breite b den Bezugspunkt für das Tunneln *vor* der Stufenkante von der unteren Terrasse zur Kante der oberen Terrasse (Bild 2.13a). Wenn μ_{ec} z. B. als konstanter Gradient auf der Oberfläche vorliegt, erzeugt die Tunnelspitze hierdurch eine Kinke im Potential. Bei einer Doppelspitze (Bild 2.13b) weitet sich die Kinke zu einem Potentialsprung aus, der die entsprechende Breite der Doppelspitze aufweist. Es gibt also so etwas wie einen Totraum vor der Stufenkante, in dem in Abhängigkeit der Spitzenform das Potential nicht korrekt erfasst werden kann. Man muss daher auch vorsichtig bei der Interpretation von gemessenen Potentialsprüngen sein: Zum einen können sie das Resultat des Abbildungsvorgangs sein, wenn sie nicht durchgängig im Potential zu sehen sind. Zum anderen wird es hierdurch schwierig, die Form eines echten Potentialsprungs, insbesondere seine eigentliche Breite und exakte Position, zu bestimmen.

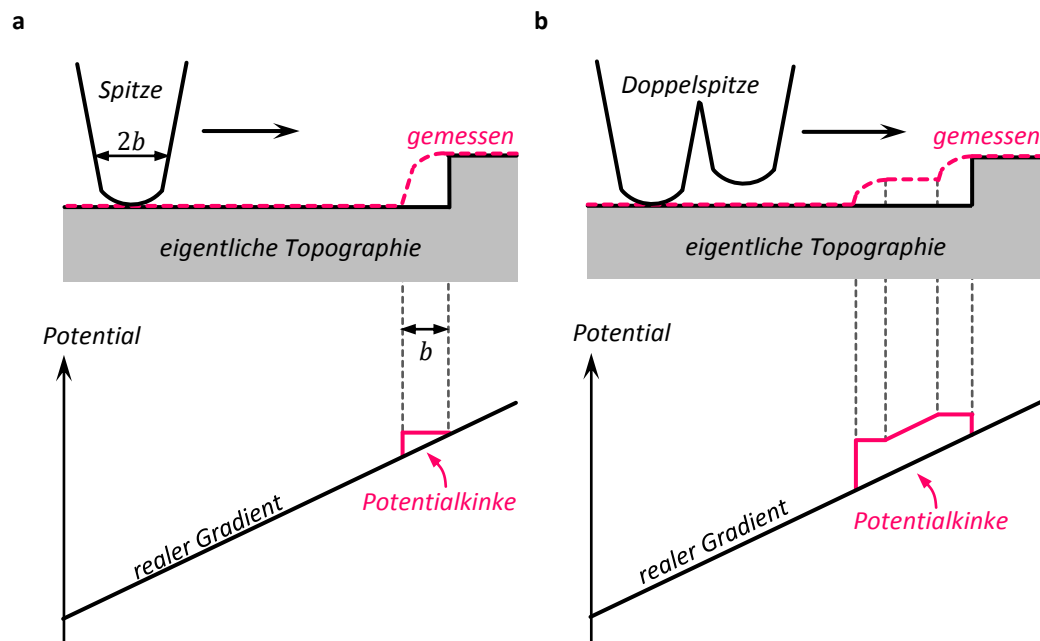


Bild 2.13 | Artefaktbildung in der STP. (a) Abbildungsprozess durch eine Einzelspitze. Im Potential wird eine Kinke erzeugt. (b) Abbildungsprozess durch eine Doppelspitze. Im Potential ergibt sich eine Kinke in Form eines Potentialsprungs mit der Breite der Doppelspitze. Zeichnung nach [37] (siehe dort im Supplement).

2.3 Mehrpunktmessungen (MPM)

Zur Ergänzung der mikroskopischen Transportmessungen aus der Rastertunnelpotentiometrie bieten sich sogenannte Mehrpunktmessungen (MPM) an, die Informationen über die Leitfähigkeit auf makroskopischer Skala liefern.

2.3.1 Dimensionscharakter der Leitfähigkeit

Neben 3D-Systemen (Volumenleiter, Bild 2.16a) können auch 2D-Systeme (Schichtleiter, Bild 2.16b) und 1D-Systeme (Drahtleiter, Bild 2.16c) vorliegen, wenn die Dicke t bzw. die Breite b gegenüber den anderen Größen vernachlässigbar klein wird. Beispiele sind auf schwach leitenden Substraten gewachsene Filme (2D) oder bestimmte Oberflächenrekonstruktionen (sowohl 1D als auch 2D). Der Zusammenhang zwischen dem an der Probe gemessenen Widerstand R ($[R] = \Omega$) und der jeweiligen Leitfähigkeit σ innerhalb der Systeme ist

$$\sigma_{3D} = \frac{1}{R} \frac{l}{b \cdot t}, \quad \sigma_{2D} = \frac{1}{R} \frac{l}{b} \quad \text{und} \quad \sigma_{1D} = \frac{1}{R} l, \quad (2.42)$$

wobei der Stromfluss in Richtung von l erfolge. Die Leitfähigkeiten weisen dabei folgende Einheiten auf: $[\sigma_{3D}] = \text{S/m}$, $[\sigma_{2D}] = \text{S}$ und $[\sigma_{1D}] = \text{S} \cdot \text{m}$. Aus dem Ohmschen Gesetz (Gleichung (2.30), wobei immer $[E] = \text{V/m}$ gilt) folgt daher für die Einheit der Stromdichte im jeweiligen System $[j_{3D}] = \text{A/m}^2$, $[j_{2D}] = \text{A/m}$ und $[j_{1D}] = \text{A}$. Für dünne Filme mit der Dicke t wird die 2D-Leitfähigkeit als Schichtleitwert G bezeichnet, wobei G sich aus folgenden Komponenten ergibt:

$$G = \sigma_{3D} \cdot t + \sigma_{2D}. \quad (2.43)$$

Zum einen leitet der Film selbst (Term $\sigma_{3D}t$), zum anderen kann seine Leitfähigkeit durch zusätzliche Transportkanäle σ_{2D} an seiner Ober- und Unterseite erhöht werden (beispielsweise durch leitende Oberflächenzustände).

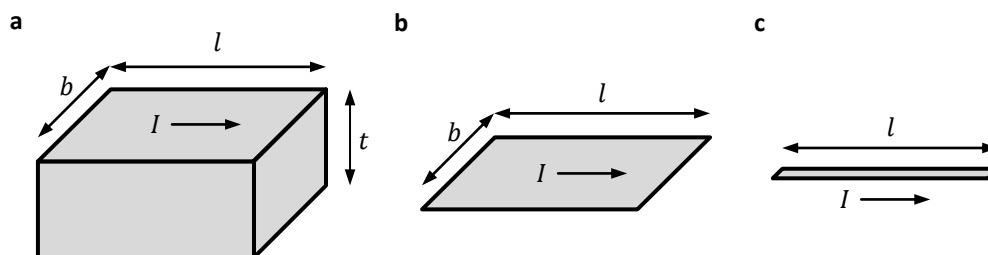


Bild 2.14| Verschiedene Leitungscharakteristika. Je nach Bewegungsfreiraum kann man für Ladungsträger (eingezeichneter Strom I) drei Leiterarten unterscheiden: Volumenleiter (3D, a), Schichtleiter (2D, b) und Drahtleiter (1D, c).

2.3.2 Stromdichte für schicht- und volumenleitende Proben

Die Kenntnis der (mikroskopischen) Stromdichte ist für die Berechnung von Leitfähigkeiten sehr wichtig, jedoch ist sie oft wie z. B. in der Rastertunnelpotentiometrie nicht direkt messbar und muss daher abgeschätzt werden. Hierfür nimmt man zur Vereinfachung an, dass die Leitfähigkeit über die gesamte Probe hinweg homogen und isotrop sei und die Probe lateral im Verhältnis zu den hier betrachteten Abständen quasi unendlich groß sei. Außerdem werde der Strom über punktförmige Kontakte in die Probe und aus der Probe geführt. Im Folgenden werden zwei Grenzfälle näher betrachtet: Schicht- und Volumenmaterial.

Im Fall des Schichtmaterials liege eine leitfähige Schicht der Dicke t auf einem praktisch isolierenden Substrat auf, d. h. der Stromtransport erfolge ausschließlich in der Schicht. Bringt man über einen Kontakt einen Strom I in die Probe ein, so wird dieser sich radial in der Schicht nach außen hin ausbreiten (siehe Bild 2.15a), wobei er Zylinderflächen mit der Fläche $A = 2\pi r t$ durchschneidet [38]. Aus der Definition der Stromdichte $j = I/A$ folgt für die vektorielle Stromdichte

$$\mathbf{j} = \frac{I}{A} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{I}{2\pi r t} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{I}{2\pi t} \frac{\mathbf{r}}{r^2}. \quad (2.44)$$

Dabei bezeichne \mathbf{r} den *relativen* Ortsvektor vom Kontaktpunkt her. Da oftmals die Schichtdicke t nicht bekannt oder bei Oberflächenrekonstruktion nur schwer zu definieren ist, benutzt man statt \mathbf{j} auch die 2D-Stromdichte $\mathbf{j}_{2D} = t \cdot \mathbf{j}$ mit $[\mathbf{j}_{2D}] = \text{A/m}$.

Im Fall des Volumenmaterials (siehe Bild 2.15b) breitet sich der Strom radial in alle Richtungen innerhalb der Probe aus und durchschneidet dabei Kugelhalbschalen mit der Fläche $A = 2\pi r^2$ [38]. Als vektorielle Stromdichte im Volumenleiter ergibt sich daher analog zu Gleichung (2.44)

$$\mathbf{j} = \frac{I}{A} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{I}{2\pi r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{I}{2\pi} \frac{\mathbf{r}}{r^3}. \quad (2.45)$$

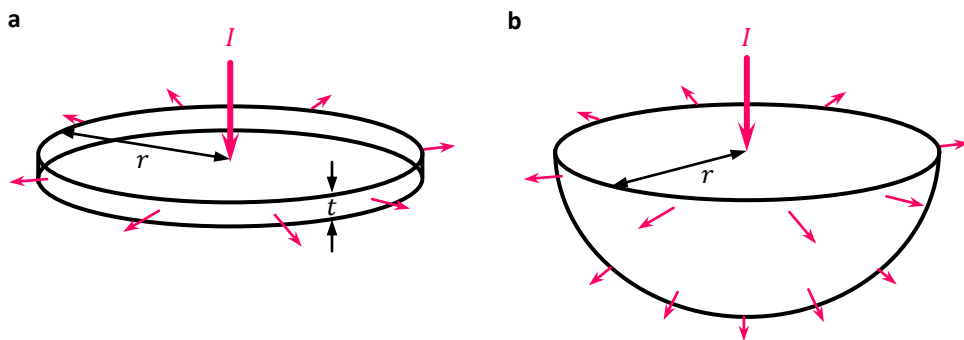


Bild 2.15 | Stromdichte für Schicht- und Volumenmaterialien. Unter der Annahme einer homogenen und isotropen Leitfähigkeit der Probe wird sich der Strom I radial vom zuführenden Kontakt entfernen. Der Strom durchschneidet dabei im Fall einer Schichtleitung Zylindermäntel (a) und im Fall einer Volumenleitung Kugelhalbschalen (b).

2.3.3 Zweipunktmessung (2PP)

Ob eine Schicht- oder Volumenleitfähigkeit der Probe vorliegt, kann zum Beispiel über eine Zweipunktsonde (engl. *two point probe*, 2PP) ermittelt werden [39]. Dafür wird die zu untersuchende Oberfläche durch zwei Messspitzen kontaktiert und für verschiedene Spitzenabstände der Widerstand ermittelt (siehe Bild 2.16). Folgende Modellannahmen werden gemacht: Der Kontakt zwischen Messspitze und Probe sei ideal leitend und habe eine Querschnittsfläche von $2\pi r_k^2$ mit r_k als mittleren Kontaktradius der Messspitzen. Der zwischen beiden Messspitzen fließende *technische* Strom sei I_{AB} und ihr Abstand werde mit d bezeichnet. Die Probe selbst habe eine homogene und isotrope Leitfähigkeit σ und sei lateral unendlich groß. Mit \mathbf{r}_A und \mathbf{r}_B als Positionen der Spitzen A und B ergibt sich für die Stromdichte auf der Oberfläche im Fall der Schichtleitung

$$\mathbf{j} = \frac{I_{AB}}{2\pi t} \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|^2} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_B}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|^2} \right). \quad (2.46)$$

Man kann über das Ohmsche Gesetz $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ (Gleichung (2.30)) die Stromdichte direkt mit dem elektrischen Feld auf der Probenoberfläche verknüpfen und damit das zugehörige elektrische Potential ϕ über die Beziehung $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ ausrechnen. Dann ergibt sich zwischen Messspitze A und B eine Potentialdifferenz $\phi_A - \phi_B$ bzw. eine Spannung von

$$V_{AB} = - \int_{r_B}^{r_A} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = - \frac{I_{AB}}{2\pi t \sigma} \int_{r_B}^{r_A} \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|^2} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_B}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|^2} \right) \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.47)$$

Zunächst kann man ausnutzen, dass die Spannung wegunabhängig ist und man daher entlang der Verbindungslinie beider Spitzen integrieren kann (hier als x -Achse bezeichnet). Man wählt dabei die Position von Spitze A bei $x = 0$ und von Spitze B bei $x = d$, wobei noch der mittlere Kontaktradius r_k der beiden Spitzen für die Spannungsangabe berücksichtigt werden muss. Es ergibt sich

$$V_{AB} = - \frac{I_{AB}}{2\pi t \sigma} \int_{d-r_k}^{r_k} \left(\frac{x}{|x|^2} - \frac{x-d}{|x-d|^2} \right) dx = \frac{I_{AB}}{\pi t \sigma} \cdot \ln \left(\frac{d}{r_k} - 1 \right). \quad (2.48)$$

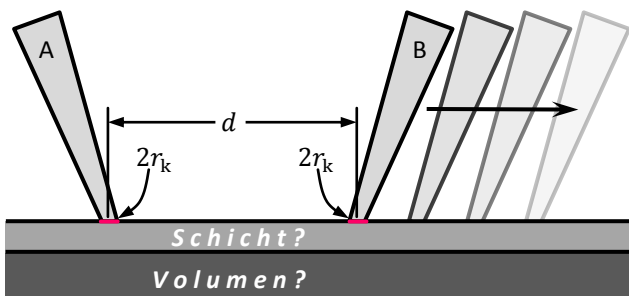


Bild 2.16 | Schema der Zweipunktmessung. Der Leitungscharakter der Probe wird bestimmt, indem zwischen den Spitzen A und B der Widerstand für verschiedene Spitzenabstände d gemessen wird [39].

Man kann noch $t\sigma$ zum Schichtleitwert G (Gleichung (2.43)) zusammenfassen und erhält dann folgende Beziehung zwischen Widerstand und Abstand:

$$R_{2D} = \frac{1}{\pi G} \cdot \ln\left(\frac{d}{r_k} - 1\right). \quad (2.49)$$

In analoger Vorgehensweise erhält man für den Fall der Volumenleitfähigkeit

$$R_{3D} = \frac{1}{\pi\sigma} \cdot \left(\frac{1}{r_k} - \frac{1}{d - r_k}\right). \quad (2.50)$$

In der Realität können (meist nicht genau bestimmbare) parasitäre Widerstände an den beiden Spitzen zusätzlich das Ergebnis der 2PP-Messung beeinflussen.

2.3.4 Vierpunktmessung (4PP)

Eine Vierpunktsonde (engl. *four point probe*, 4PP) ermöglicht die gleichzeitige Messung von Strom und Spannung auf einer Probe ohne den störenden Einfluss parasitärer Widerstände (L. B. Valdes 1954 [40], nachfolgende Darstellung aus Miccoli et al. [38] entnommen). Man bringt hierfür vier Messspitzen auf eine Probenoberfläche. Eine übliche Messgeometrie ist die äquidistante Aufreihung der Messspitzen mit dem Abstand a . (siehe Bild 2.17). Der Strom I wird über die Messspitzen A und B durch die Probe geleitet. Die Spannung V wird über die Messspitzen C und D gemessen. Den Zusammenhang für den Schichtleitwert bzw. die Volumenleitfähigkeit erhält man, indem man für die Gleichungen (2.49) und (2.50) $d = 3a$ und $r_k = a$ einsetzt, d. h., die Spannung wird nicht mehr an den Kontaktenden von Spitze A und B gemessen, sondern an den Positionen der Spitzen C und D. Dabei seien die Kontaktradien der Spitzen vernachlässigbar klein gegenüber dem Abstand a der Spitzen untereinander. Es ergibt sich für den Vierpunktswiderstand $V/I = V_{CD}/I_{AB}$ der Vierpunktmessung im Fall der Schichtleitung (2D) bzw. im Fall der Volumenleitung (3D)

$$\frac{V}{I} = \frac{\ln 2}{\pi G} \quad \text{bzw.} \quad \frac{V}{I} = \frac{1}{2\pi a\sigma}. \quad (2.51)$$

Hierbei sind G der Schichtleitwert bzw. σ die Volumenleitfähigkeit der Probe.

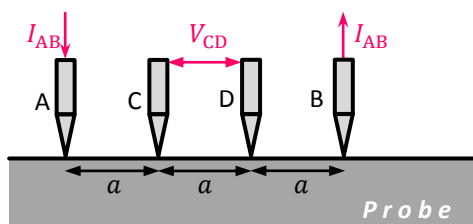


Bild 2.17| Schema der klassischen linearen Vierpunktmessung. Über die Messspitzen A und B wird der Strom durch die Probe geleitet und über die Messspitze C und D die entsprechende Spannung auf der Probenoberfläche gemessen.

Man muss bei den Formeln in Gleichung (2.51) beachten, dass die Annahme einer unendlich ausgedehnten Probe nicht immer erfüllt ist und daher Korrekturfaktoren nötig werden können [38].

Man kann auch mit der linearen Vierpunktmessung den Leitungscharakter der Probe bestimmen (siehe [41] und seinem Supplement). Hierzu wird bei der klassischen linearen Vierpunktmessung die Strecke zwischen der Spitze D und der Spitze B variiert (nachfolgend als s bezeichnet, siehe auch Bild 2.18), wobei die Abstände zwischen den Spitzen A, C und D gleich bleiben. Zunächst sei der Fall einer reinen Schichtleitung betrachtet. Die Spannung zwischen den Messspitzen C und D ergibt sich analog zu Gleichung (2.47) zu

$$V_{CD} = -\frac{I_{AB}}{2\pi G} \int_{r_D}^{r_C} \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|^2} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_B}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|^2} \right) \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.52)$$

Da eine lineare Messgeometrie vorliegt, kann man entlang der Verbindungslinie der Spitzen (hier wieder als x -Achse bezeichnet) integrieren. Die Position von Spitze A sei bei $x = 0$, die Position von Spitze C bei $x = a$, die Position von Spitze D bei $x = 2a$ und die Position von Spitze B bei $x = 2a + s$. Damit ergibt sich die Spannung zwischen den Spitzen C und D zu

$$V_{CD} = \frac{I_{AB}}{2\pi G} \int_a^{2a} \left(\frac{x}{|x|^2} - \frac{x - (2a + s)}{|x - (2a + s)|^2} \right) dx = \frac{I_{AB}}{2\pi G} \cdot \ln \left(\frac{2a}{s} + 2 \right). \quad (2.53)$$

Es ergibt sich für die Abhängigkeit des Vierpunktwidestands V_{CD}/I_{AB} von der Strecke s zwischen der Spitze D und der Spitze B im Fall einer Schichtleitung ähnlich wie bei der Zweipunktmessung ein logarithmischer Zusammenhang:

$$\frac{V}{I} = \frac{1}{2\pi G} \cdot \ln \left(\frac{2a}{s} + 2 \right). \quad (2.54)$$

In analoger Vorgehensweise erhält man für den Fall der Volumenleitfähigkeit

$$\frac{V}{I} = \frac{1}{2\pi\sigma} \cdot \left(\frac{1}{2a} + \frac{1}{s} + \frac{1}{a+s} \right). \quad (2.55)$$

Auch hier ist das reziproke Verhalten ganz ähnlich dem Volumenfall bei der Zweipunktmessung.

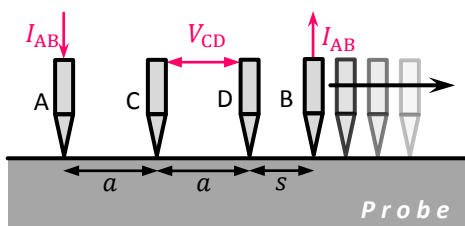


Bild 2.18| Abstandsbabhängige lineare Vierpunktmessung. Messung analog zu Bild 2.17, bei der die Strecke s der stromführenden Spitze B zur Position der Spitze D variiert wird.

Bisher wurden nur isotrop leitende Proben betrachtet. Hat die Probe jedoch eine anisotrope Leitungseigenschaft mit drei Komponenten in x -, y -, und z -Richtung, ist der in Gleichung (2.51) für eine lineare äquidistante Vierpunktmessgeometrie angegebene Schichtleitwert G bzw. die Volumenleitfähigkeit σ das geometrische Mittel der einzelnen Komponenten [38]:

$$G = \sqrt{G_x \cdot G_y} \quad \text{bzw.} \quad \sigma = \sqrt{\sigma_y \cdot \sigma_z}. \quad (2.56)$$

Dabei liegt die Verbindungslinie der Messspitzen entlang der Richtung der x -Komponente der entsprechenden Leitfähigkeit.

Prinzipiell kann man die Komponenten für die Volumenleitfähigkeit σ durch die Drehung der Messgeometrie herausfinden, wobei dies recht umständlich ist. Man misst zuerst $(\sigma_y \sigma_z)^{1/2}$, dreht die Verbindungslinie in der x - y -Ebene um 90° und misst $(\sigma_x \sigma_z)^{1/2}$. Anschließend misst man $(\sigma_x \sigma_y)^{1/2}$, indem eine entsprechende Platte aus der Probe herausgeschnitten wird.

Die Komponenten des Schichtleitwerts G können nicht aus einer Drehung der Messgeometrie auf der x - y -Ebene bestimmt werden, da man stets das gleiche geometrische Mittel $(G_x G_y)^{1/2}$ bei der linearen Vierpunktmessung erhält. Hierfür bietet sich stattdessen eine Methode nach Kanagawa et al. [42] an, bei der die Messspitzen in Form eines Quadrats angeordnet werden, das schrittweise um den Winkel θ in der x - y -Ebene gedreht wird (siehe Bild 2.19). Dabei wird jeweils der Vierpunktswiderstand V_{CD}/I_{AB} gemessen. Der Vierpunktswiderstand hat gemäß [42] folgende Winkelabhängigkeit:

$$\frac{V_{CD}}{I_{AB}} = \frac{1}{2\pi \sqrt{G_x \cdot G_y}} \times \ln \sqrt{\frac{\left(\frac{G_x}{G_y} + 1\right)^2 + 4(\sin \theta)^2 (\cos \theta)^2 \left(\frac{G_x}{G_y} - 1\right)^2}{\left((\sin \theta)^2 + \frac{G_x}{G_y} (\cos \theta)^2\right)^2}}. \quad (2.57)$$

Man kann hieraus die Komponenten G_x und G_y des Schichtleitwerts zuverlässig bestimmen. Eine Herleitung von Gleichung (2.57) findet sich im Appendix C von Referenz [38].

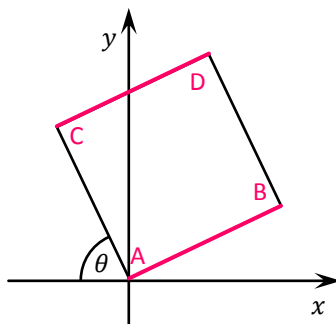


Bild 2.19 | Vierpunktmessung nach Kanagawa et al. [42]. Die Messspitzen werden in Form eines Quadrats angeordnet, das um den Winkel θ schrittweise gedreht wird. Der Strom fließt zwischen A und B, während zwischen C und D die Spannung gemessen wird. Zeichnung nach [38].

2.4 Rasterelektronenmikroskop (SEM)

In dieser Arbeit wird ein Rasterelektronenmikroskop (engl. *scanning electron microscope*, kurz SEM) zur Beobachtung der Probe eingesetzt, um die Positionierung von Kontakten auf der Probenoberfläche zu erleichtern. M. von Ardenne entwickelte 1938 das erste funktionsfähige SEM [43]. Die nachfolgende Darstellung entstammt einem Buch von H. Lüth [44].

2.4.1 Prinzip des SEM

Beim SEM rastert ein fokussierter Elektronenstrahl die Probenoberfläche als Sonde ab (siehe Bild 2.20) und die von der Sonde ausgelösten Elektronen werden als Messsignal registriert, wobei der SEM-Aufbau sich zumindest unter Hochvakuum befindet. Den Elektronenstrahl erzeugt man folgendermaßen: Durch eine Kathode werden freie Elektronen erzeugt und auf eine Lochanode beschleunigt. Die an die Anode angelegte Beschleunigungsspannung V_A bestimmt dabei die Energie $E_0 = eV_A$ der Elektronen, die typischerweise zwischen 1–100 keV liegt. Um die Kathode befindet sich ein Wehneltzylinder, der gegenüber der Kathode auf negativem Potential V_W liegt. Zusammen mit der Anode und dem Wehneltzylinder wird der Elektronenstrahl derart gebündelt, dass es zu einer Strahlüberschneidung (engl. *cross over*) des Elektronenstrahls kommt. Der Cross-Over dient als virtuelle Elektronenquelle und wird mittels einer Elektronenoptik auf die Probenoberfläche als Elektronensonde verkleinert abgebildet (Verkleinerung im Bereich von 10^3).

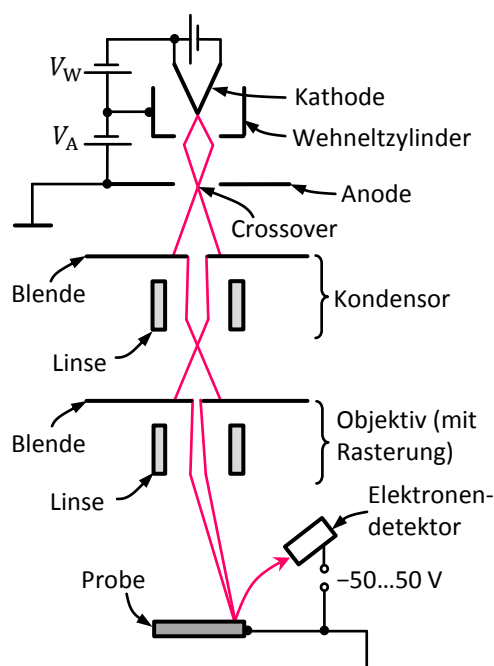


Bild 2.20| Schema eines SEM. Beim SEM wird ein Elektronenstrahl mittels einer Elektronenoptik auf eine Probe fokussiert und zeilenweise über diese gerastert. Die dabei aus der Probe austretenden Elektronen werden über einen Elektronendetektor registriert. Zeichnung nach [15].

Die Elektronenoptik besteht dabei aus Kondensor und Objektiv, die mittels elektrostatischen oder elektromagnetischen Linsen aufgebaut werden, wobei gewöhnlich elektromagnetische Linsen wegen ihrer kleineren Abbildungsfehler bevorzugt werden. Die Elektronensonde (bei hochauflösenden SEM etwa 1 nm) erzeugt auf der Probenoberfläche freie Elektronen, die durch einen Elektronendetektor registriert werden. Ein Gitter vor dem Detektor kann mit einer Saug- oder Gegenspannung von etwa ± 50 V gegenüber der Probe belegt werden, um Elektronen zum Detektor zu saugen oder von ihm fernzuhalten. Um eine SEM-Aufnahme zu erhalten, wird die Elektronensonde durch eine in die Elektronenoptik integrierte Rasterung zeilenweise über die Probe geführt und die am Detektor registrierte Intensität I über die Rasterposition aufgetragen. Positionen, die von Objekten (z. B. durch Kontaktspitzen) gegenüber dem Detektor verdeckt sind, erscheinen in SEM-Aufnahmen dunkler, da Elektronen von dort aus den Detektor schlechter erreichen. Außerdem kann die Elektronenausbeute aus der Probe durch die Elektronensonde in Abhängigkeit der entsprechenden lokalen Materialzusammensetzung und Materialbeschaffenheit stark variieren, sodass verschiedene Materialien in der SEM-Aufnahme unterschiedlich hell erscheinen.

2.4.2 Abbildungsvorgang beim SEM

Die durch die Elektronensonde erzeugten freien Elektronen sind nicht gleichartig, sondern sie lassen sich ihrem Ursprung nach klassifizieren. Bild 2.21a zeigt die Intensitätsverteilung der austretenden Elektronen in Abhängigkeit ihrer Elektronenenergie E relativ zur Energie der Primärelektronen E_0 der Elektronensonde. Bild 2.21b zeigt die räumliche Abhängigkeit der in Bild 2.21a dargestellten Elektronenerzeugung (sogenannte Streubirne).

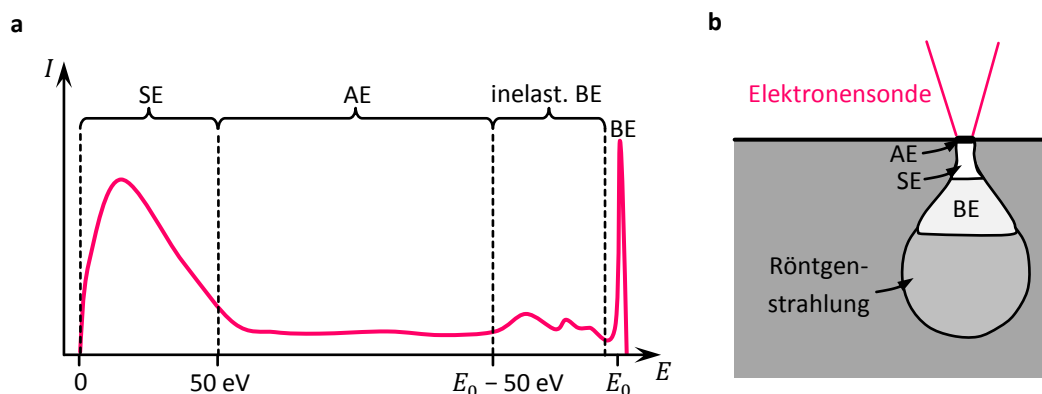


Bild 2.21 | Elektronenerzeugung durch die Elektronensonde. (a) Schematisches Diagramm der relativen Intensität I der austretenden Elektronen in Abhängigkeit ihrer Energie E relativ zur Energie E_0 (hier 2 keV) der Primärelektronen der Elektronensonde. (b) Skizze der räumlichen Abhängigkeit der Elektronenerzeugung (Streubirne). Abkürzungen: Sekundärelektronen (SE), Augerelektronen (AE) und rückgestreute Primärelektronen (BE). Diagramme nach [44].

Es werden gemäß ihrem Ursprung folgende Elektronenarten unterschieden:

- **Rückstreuелеktronen (BE).** Rückstreuелеktronen (engl. *backscattered electrons*) können entweder aus einem elastischen Streuprozess ($E = E_0$) oder aus einem inelastischen Streuprozess ($E_0 - 50 \text{ eV} < E < E_0$) stammen. Die Intensität der inelastisch rückgestreuten Elektronen ist im Vergleich zu den elastisch rückgestreuten Elektronen deutlich kleiner und variiert in Abhängigkeit ihres Energieverlustes bei der Streuung. Ursache hierfür ist die Anregung von Plasmonen und Interbandübergängen. Diese Effekte sind sehr materialspezifisch, sodass die reine Detektion von Rückstreuелеktronen zu einem materialabhängigen Kontrast führt.
- **Augerelektronen (AE).** Im Bereich $50 \text{ eV} < E < E_0 - 50 \text{ eV}$ der Elektronenenergie E erscheint ein Untergrund mit Augerlinien niedriger Intensität, die charakteristisch für die vorhandenen chemischen Elemente sind. Komplementär kommt es auch zur Aussendung charakteristischer Röntgenstrahlung. Nimmt man die Intensität der Röntgenstrahlung oder der Augerelektronen mit einem entsprechenden Detektor in Abhängigkeit der Rasterposition auf, erhält man ein Bild der lateralen Verteilung der chemischen Elemente auf der Probe (sogenannter Mikrograph). Wegen ihrer begrenzten Durchdringungsfähigkeit der Probenoberfläche sind Augerelektronen lateral auf die Elektronensonde beschränkt und haben eine Tiefeninformation von etwa $0.1\text{--}10 \text{ nm}$. Wegen der großen Streubirne (Bild 2.21b) für Röntgenlicht geht ihre laterale Auflösung deutlich über die Größe der Elektronensonde hinaus und die Tiefeninformation liegt bei etwa $0.1\text{--}10 \mu\text{m}$. Neben charakteristischer Röntgenstrahlung tritt auch Bremsstrahlung und Röntgenfluoreszenz auf.
- **Sekundärelektronen (SE).** Sekundärelektronen sind Elektronen, die auf ihrem Weg zur Probenoberfläche mehrfach an Streuprozessen beteiligt waren und daher Elektronenenergien im Bereich von 0 bis 50 eV aufweisen. Aufgrund ihrer geringen Energie lassen sich die Sekundärelektronen durch ein Gegenfeld leicht vom Detektor fernhalten. Aus Bild 2.21a wird deutlich, dass Sekundärelektronen den Hauptteil der Intensität der aus der Probe emittierten Elektronen bilden, wobei sie weder eine bestimmte Winkelabhängigkeit noch einen elementspezifischen Intensitätsverlauf aufweisen. Allerdings hängt die Intensität von Austrittsarbeit und Rauigkeit der Probenoberfläche ab. Hierdurch entsteht ein guter Materialkontrast verbunden mit einem hohen Detailkontrast. Wegen des diffusiven Charakters ist gemäß Bild 2.21b die laterale Verteilung der Sekundärelektronen größer als die Elektronensonde.

Die an die Probe durch die Streuprozesse abgegebene Energie wird in der Probe zu einem Großteil in Wärme umgewandelt.

2.5 Niederenergetische Elektronenbeugung (LEED)

Die niederenergetische Elektronenbeugung (engl. *low electron energy diffraction*, kurz LEED) wurde 1927 von C. Davisson und L. H. Germer entdeckt [45] und ermöglicht die Untersuchung der atomaren Anordnung auf Kristalloberflächen. Die nachfolgende Darstellung entstammt einem Buch von H. Lüth [44].

2.5.1 LEED-Apparatur

Die Erzeugung des Elektronenstrahls bei LEED (siehe Bild 2.22) geschieht ganz analog zum SEM (Kapitel 2.4.1, Seite 33), wobei sich der Aufbau unter Ultrahochvakuum befindet. Aus einer Kathode werden freie Elektronen erzeugt, die über einen gegen die Kathode negativ geladenen Wehneltzylinder (V_W) gebündelt und über eine Anodenspannung V_A (20–500 V) auf eine Lochanode beschleunigt werden. Der Elektronenstrahl wird in ein System elektrooptischer Linsen eingekoppelt und auf die geerdete Probe verkleinert abgebildet. An der Probe werden die Elektronenstrahlen in Abhängigkeit der atomaren Oberflächenstruktur und der Energie des Elektronenstrahls gebeugt. Um die Probe befindet sich ein gewölbtes Gittersystem (siehe Bild 2.22), das die gebeugten Elektronenstrahlen durchquert. Dahinter liegt auf einem hohen negativen elektrischen Potential V_S (1–10 kV) ein Leuchtschirm, auf dem das Beugungsbild erzeugt wird. Das innere, zur Probe gewandte Gitter schirmt den Raum zur Probe vor elektrischen Störfeldern ab, damit die Beugung unbeeinflusst bleibt. Das mittlere Gitter (sogenannter Suppressor) liegt gegenüber der Kathode um eine kleine Spannung ΔV höher, um inelastisch gestreute Elektronen zurückzuhalten. Zwischen Suppressor und Leuchtschirm befindet sich ein drittes, geerdetes Gitter, das den Suppressor gegen den elektrischen Durchgriff der Hochspannung am Leuchtschirm schützt.

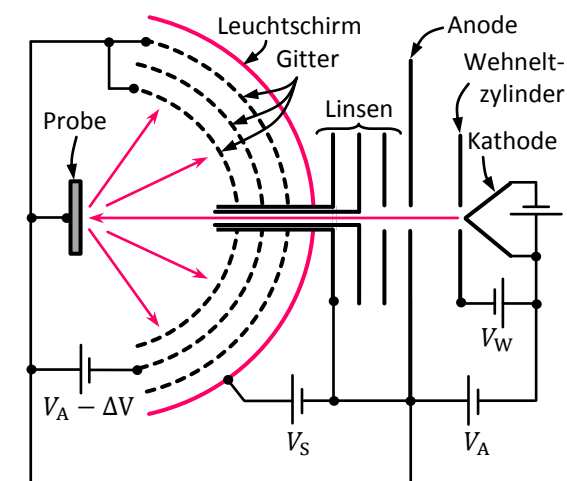


Bild 2.22| Schematischer Aufbau einer LEED-Apparatur. Für LEED wird mittels einer Elektronenoptik ein möglichst monochromatischer Elektronenstrahl erzeugt, der auf eine Probe gelenkt wird. An der Probenoberfläche wird der Elektronenstrahl abhängig von der atomaren Struktur der Probenoberfläche gebeugt und durch einen Leuchtschirm als Beugungsbild sichtbar gemacht. Zeichnung aus [15].

Die Energie $E = eV_A$ der Elektronen wird durch die angelegte Anodenspannung bestimmt und liegt im Bereich von 20–500 eV. Die Wellenlänge λ der Elektronen ist durch die de-Broglie-Beziehung

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV_A}} = 1228 \text{ pm} \cdot \frac{1}{\sqrt{E(\text{in eV})}} \quad (2.58)$$

gegeben und beträgt daher etwa 60–270 pm. Dies ist der typische Bereich für die Periodizität von Oberflächen und Oberflächenrekonstruktionen. Die Eindringtiefe der Elektronen in die Oberfläche liegt gemäß M. P. Seah und W. A. Dench [46] bei etwa 0.5 bis 1 nm. Aufgrund der verwendeten Wellenlängen und der auftretenden Eindringtiefen ist LEED hervorragend für die Betrachtung der Beugung an Oberflächen geeignet.

2.5.2 Reziproker Raum und Beugung bei LEED

Für LEED ist vor allem das Verständnis der elastischen Elektronenbeugung an einem periodischen Gitter wichtig. Die Basisvektoren des periodischen Gitters seien \mathbf{a}_i . Der Gittervektor \mathbf{R} , mit dem von einem Punkt des Gitters jeder andere beliebige Punkt des Gitters erreicht werden kann, ist als Summe der Basisvektoren definiert: $\mathbf{R} = \sum_i \alpha_i \mathbf{a}_i$, wobei α_i ganze Zahlen sind. Da bei der elastischen Beugung vor allem die Änderung der Wellenzahl $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda$ wichtig ist, betrachtet man für die Beugung nicht das Gitter im Realraum, sondern im Raum der Wellenzahlen (k -Raum oder auch reziproker Raum genannt). Die Basisvektoren \mathbf{b}_j des reziproken Raums spannen ganz analog zum Realraum das reziproke Gitter auf (siehe Bild 2.23a). Zudem lässt sich ganz analog zum Realraum ein reziproker Gittervektor $\mathbf{G} = \sum_j \beta_j \mathbf{b}_j$ definieren, wobei β_j wieder ganze Zahlen sind.

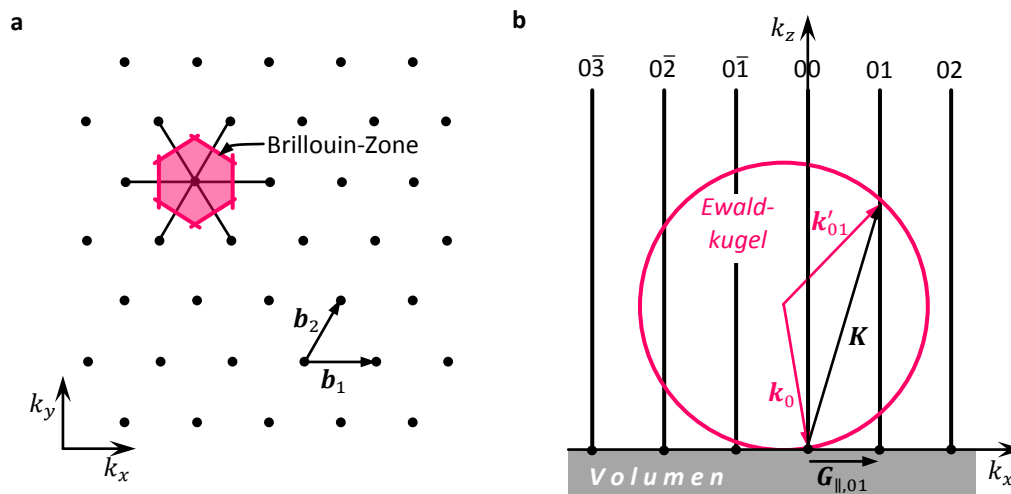


Bild 2.23 | Reziprokes Gitter in 2D. (a) Beispielhaftes hexagonales reziprokes 2D Gitter mit eingezeichneten Basisvektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 und Brillouin-Zone in der k_x - k_y -Ebene. (b) Beugungsbedingung (Ewaldkonstruktion) an der Probenoberfläche in der k_x - k_z -Ebene. Bilder nach [44].

Die reziproken Basisvektoren \mathbf{b}_j stehen orthonormal zu den Basisvektoren \mathbf{a}_i des realen Gitters, d. h. $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Daher lassen sie sich entsprechend dieser Eigenschaft aus den Basisvektoren \mathbf{a}_i des realen Gitters konstruieren. Ein wichtiges Element im reziproken Gitter ist die sogenannte Brillouinzone (BZ). Man erhält sie, indem man Verbindungslinien zu den nächsten Nachbargitterpunkten zieht und die Verbindungslinien durch Mittelsenkrechten (2D-Gitter) bzw. Normalebenen (3D-Gitter) halbiert. Die eingeschlossene Fläche (2D-Gitter) bzw. der eingeschlossene Raum (3D-Gitter) bildet die BZ, die nur einen Gitterpunkt enthält (primitives Gitterelement) und wegen ihrer Lage im reziproken Gitter *rand-periodisch* ist. Das Pendant der BZ im Realraum ist die Wigner-Seitz-Zelle.

Im einfachsten Fall kann man eine kristalline Oberfläche als ideales 2D-Gitter betrachten, bei dem die zur Oberfläche senkrechte Dimension z fehlt, d. h. $\Delta z \rightarrow 0$. Im reziproken Raum (Raum der Kehrwerte) wird $k_z = 2\pi/\Delta z \rightarrow \infty$, d. h., die reziproken Gitterpunkte werden in k_z -Richtung zu Stäben ausgezogen (siehe Bild 2.23b). Man erhält nun die möglichen Reflexe bei elastischer Beugung durch folgende Konstruktion (siehe Bild 2.23b): Der Wellenvektor \mathbf{k}_0 der auf die Probenoberfläche einfallenden Elektronen wird an den Anfang eines Gitterstabs gesetzt, der als Ursprung (00) des reziproken Gitters definiert wird, wobei \mathbf{k}_0 nicht notwendigerweise senkrecht zum reziproken Gitter stehen muss. Um seinen Anfang wird der Wellenvektor \mathbf{k}' der elastisch gebeugten Strahlen gesetzt und um den Anfangspunkt von \mathbf{k}_0 gedreht. Dabei hat \mathbf{k}' den Betrag $k' = k_0$ und es wird eine Kugelfläche mit Radius k_0 beschrieben (sogenannte Ewaldkugel). Wenn der Differenzvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}_0$ den Ursprung des reziproken Gitters mit einem Gitterstab (hk) (auch der zu (00) gehörende ist möglich) verbindet, liegt eine konstruktive Beugungsbedingung vor und es entsteht ein Reflex. Die Projektion \mathbf{K}_{\parallel} von \mathbf{K} auf die Oberfläche erfüllt mit dem entsprechenden reziproken Gittervektor $\mathbf{G}_{\parallel, hk}$ im reziproken 2D-Gitter die Lauegleichung

$$\mathbf{K}_{\parallel} = \mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel, 00} = \mathbf{G}_{\parallel, hk} = \frac{2\pi}{d_{hk}}, \quad (2.59)$$

wie man sie auch aus der kinematischen Beugungstheorie erhält. Dabei ist d_{hk} der Abstand der entsprechenden Netzebenen (hk) im Realraum. Man kann aus dem geometrischen Abstand der Reflexe auf dem Leuchtschirm exakt das Verhältnis verschiedener Gitterkonstanten zueinander bestimmen und prinzipiell die jeweilige Gitterkonstante an der Oberfläche berechnen, wenn die eigentliche Gitterstruktur bekannt ist. Da im realen LEED-Experiment die Eindringtiefe nicht auf die oberste Atomlage und damit auf ein ideales 2D-Gitter beschränkt ist, kommt es in Abhängigkeit des Wellenvektors bzw. der Elektronenenergie durch zusätzliche Interferenzeffekte zwischen den Atomlagen zu Intensitätsschwankungen der LEED-Reflexe.

3 Experiment

3.1 Messapparatur

Als Messapparatur dient eine Anlage der Firma Omicron GmbH (Modellbezeichnung „Nanoprobe“), in der unter Ultrahochvakuum(UHV)-Bedingungen experimentiert werden kann. Nachfolgend (Bild 3.1) ist die Grundkonstruktion der Messapparatur mit der Belegung der Flansche sowie eine Photographie der gesamten Anlage (Bild 3.2) gezeigt:

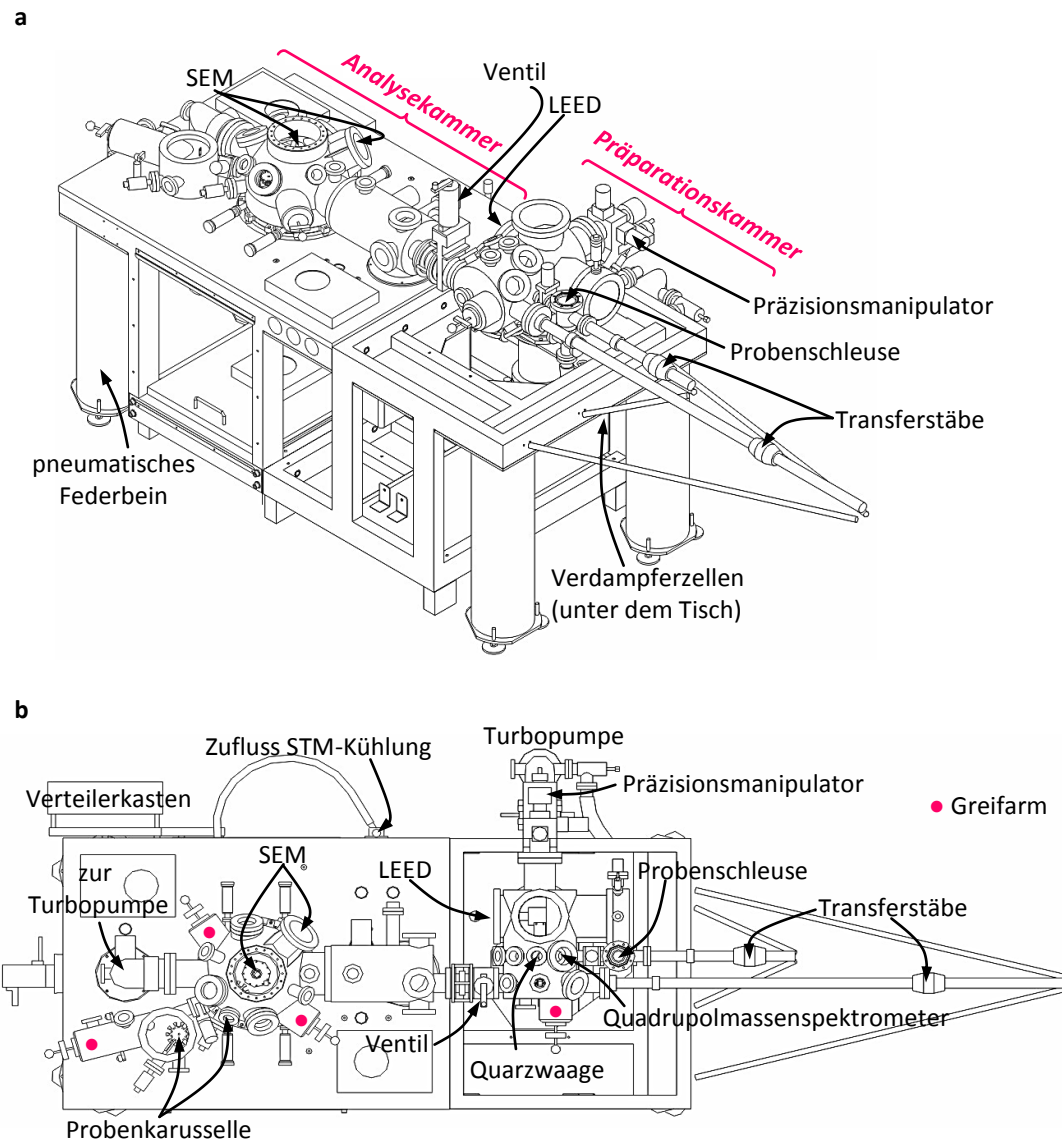


Bild 3.1 | Grundkonstruktion der Messapparatur. (a) Isometrische Ansicht. (b) Aufsicht. Die wichtigsten Bauelemente und die Belegung der Flansche sind gekennzeichnet. Entnommen aus [15], technische Zeichnungen von der Firma Omicron GmbH (2002).

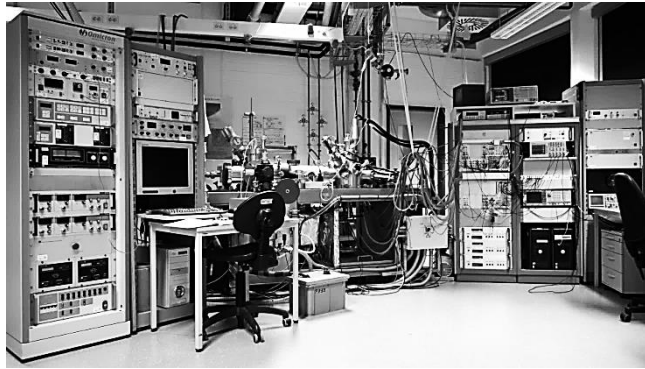


Bild 3.2| Photographie der gesamten Anlage von der Seite des Verteilerkastens aus. Von links nach rechts sieht man die Racks für die Steuerung der Pumpen und der Instrumente in der Präparationskammer, die UHV-Anlage selbst und an der rechten Seite die Racks der STM- und SEM-Elektronik.

Die Kammer ruht auf vier pneumatischen Federbeinen, die sie vom Boden und damit von Gebäudeschwingungen und Erschütterungen > 3 Hz entkoppeln. Die Messapparatur selbst gliedert sich in eine Präparationskammer zur Herstellung von Proben und in eine Analysechamber zur Untersuchung der Proben. Beide Kammern sind durch ein Plattenventil miteinander verbunden (siehe Bild 3.1).

Die UHV-Bedingungen innerhalb der Messapparatur werden durch ein mehrteiliges Pumpensystem geschaffen. Zum schnellen Abpumpen von Gas nach außen ist bei beiden Kammern eine Turbomolekularpumpe (nachfolgend kurz Turbopumpe genannt) angebracht, die über ein Plattenventil von der jeweiligen Kammer getrennt werden kann. Als Vorpumpe für die Turbopumpe dient jeweils eine Drehschieberpumpe. Da die Turbo- und Drehschieberpumpen während der schwingungsempfindlichen Tunnelmikroskopie stören würden, sind sie im normalen Betrieb abgeschaltet und von den Kammern über das Plattenventil getrennt. Damit das Vakuum im Inneren erhalten bleibt, wird in beiden Kammern jeweils eine Getterpumpe in Verbindung mit einer Sublimationspumpe permanent betrieben. Man erreicht hierdurch einen Kammerdruck von etwa 2×10^{-10} mbar, sodass störende Prozesse wie z.B. die Oxidation von Proben durch das vorhandene Restgas stark verlangsamt werden. Die Druckmessung erfolgt innerhalb beider Kammern und vor den Turbomolekularpumpen über Bayard-Alpert-Röhren. Der Vordruck wird jeweils am entsprechenden Stutzen der Turbopumpen über Piraniröhren ermittelt. Nach einem Belüften der Messapparatur kann diese nicht einfach wieder abgepumpt werden, da der auf den Kammerwänden zurückbleibende Wasserfilm einen Druck kleiner als etwa 1×10^{-8} mbar verhindert. Man muss daher die gesamte Anlage mithilfe einer Ausheizkonstruktion bei einer Temperatur von etwa 130°C für drei Tage ausbacken und dabei mit den Turbopumpen das abdampfende Wasser beständig abpumpen. Getter- und Sublimationspumpe bleiben währenddessen ausgeschaltet und geben die von ihnen gebundenen Gase frei, die durch die Turbopumpen aus den Kammern befördert werden.

Um von außen Gegenstände im UHV bewegen zu können, besitzt die Messapparatur zwei Transferstäbe, einen Präzisionsmanipulator und vier Greifarme (siehe Bild 3.1b). In den nachfolgenden Abschnitten wird über die Beschreibung des Wegs einer Probe bzw. einer Spitze in die Messapparatur die Funktion der Präparations- und Analysenkammer erläutert.

3.1.1 Präparationskammer

Eine Probe bzw. eine Tunnelspitze nimmt ihren Weg in die Messapparatur über die Probenschleuse (siehe Bild 3.1), die über ein Ventil mit der Präparationskammer verbunden ist. Bei geschlossenem Ventil und belüfteter Schleuse kann die Transferplatte (Omicron-System) der Probe bzw. Spitze in einen kurzen Transferstab eingesteckt werden. Über einen Bypass zur Turbopumpe der Präparationskammer kann die Schleuse bis auf einen Druck von 5×10^{-8} mbar abgepumpt und das Ventil geöffnet werden. Man kann dann über den Transferstab die Transferplatte in einen Präzisionsmanipulator in der Kammer stecken. Der Präzisionsmanipulator erlaubt es, die Probe bzw. Tunnelspitze um nahezu 360° zu drehen und über eine Linearverschiebung zu bewegen, sodass alle für die Präparation der Probe bzw. der Tunnelspitze erforderlichen Instrumente angefahren werden können. Zudem kann der Manipulator über ein Filament unter dem Steckplatz der Transferplatten diese auf ca. 600°C heizen. Ein Kryostat ermöglicht das Kühlen des Manipulatorkopfes auf bis zu -140°C , wenn flüssiger Stickstoff als Kühlmittel eingesetzt wird. Zusätzlich hat der Manipulator noch einen Kontakt, mit dem ein elektrischer Strom über entsprechende Probenhalter geführt werden kann. Nachdem die Probe bzw. Spitze eingebracht und das Ventil zur Schleuse geschlossen ist, wird die Probe bzw. die Spitze auf etwa 100°C geheizt, sodass Wasser abdampfen kann. Dies erfolgt, bis ein Druck von etwa 2×10^{-9} mbar erreicht ist (Dauer etwa 60-90 min). In der Kammer befinden sich folgende Instrumente für die Proben- bzw. Spitzenpräparation:

- **LEED-Apparatur.** Typ SpectaLEED der Omicron GmbH. Die Elektronenenergie liegt im Bereich 0-1000 eV. Ein thoriumbedampftes Wolframfilament dient als Elektronenquelle (max. Betriebsdruck 5×10^{-6} mbar).
- **Fenster mit Pyrometerhalterung.** Von außen kann ein Pyrometer (Typ IGA 200-L der Impac Electronic GmbH) auf das Fenster gesetzt werden, um berührungsfrei die Temperatur von Proben im Bereich 350°C bis etwa 1800°C zu messen.
- **Drei Flansche für Verdampfer.** Es können drei Verdampfer an die Kammer angeflanscht werden. Einer der UHV-Flansche ist so ausgeführt, dass der angeschlossene Verdampfer ausgeschleust werden kann. Es stehen folgende Verdampfer zur Verfügung (max. Betriebsdruck 2×10^{-5} mbar):
 - Elektronenstoßverdampfer für einen Tiegel oder einen Stab. Typ mini-Vap 100 der MDC Corp., maximale Leistung 100 W.
 - Elektronenstoßverdampfer mit einem Tiegel. Typ Eigenbau der Arbeitsgruppe Prof. Michael Horn-von Hoegen (Universität Duisburg-Essen), maximale Leistung etwa 50 W.
 - Elektronenstoßverdampfer mit zwei Tiegeln. Typ Eigenbau der Arbeitsgruppe Prof. Rolf Möller (Universität Duisburg-Essen), basierend auf der Konstruktion der AG Horn-von Hoegen (vgl. auch Kapitel 3.4.4 und 9.1). Maximale Leistung je Tiegel 30 W.
 - Knudsenzelle mit einem Tiegel, Typ k-cell der Oxford Instr. Ltd.

- Thermischer Verdampfer mit drei Tiegeln zum Verdampfen von Molekülen, Typ Eigenbau der AG Prof. Rolf Möller (Universität Duisburg-Essen).
- Dispenser mit Schiffchen, Typ Eigenbau der AG Prof. Rolf Möller (Universität Duisburg-Essen).

Normalerweise sind der thermische Verdampfer und der Elektronenstoßverdampfer von MDC fest verbaut und nur die schleusbare Position wird mit den anderen Verdampfern bestückt.

- **Quarzwaage.** Typ QSK 135 der Balzers AG. Die Quarzwaage arbeitet mit einem 5 MHz Dickenserschwingquarz, dessen Frequenz sich bei Belegung mit einem Aufdampfmaterial erniedrigt. Über ein Messgerät (Typ QSG 301 der Balzers AG) kann durch Eingabe der Dichte des zu verdampfenden Materials aus der Frequenzverschiebung die Aufdampfrate bestimmt werden.
- **Massenspektrometer.** Typ QMA 400 der Pfeiffer Vacuum GmbH. Das Massenspektrometer ermöglicht die Detektion von Massen bis 1024 u, sodass die Reinheit der Verdampferstrahlen überprüft werden kann. Einsetzbar bis max. 1.5×10^{-5} mbar.
- **Ionenkanone.** Typ Penningquelle PS-IQP 10/63 der Leybold-Heraeus GmbH. Der erforderlicher Quelldruck beträgt etwa 1.5×10^{-5} mbar, die Nachbeschleunigung der Ionen bis zu 5 keV und der maximale Ionenstrom etwa 50 μ A. Die Ionenkanone wird für die Reinigung von Proben mittels Sputtern genutzt.
- **Glühwendel.** Typ Xenophot 64634 HLX EFR der Osram GmbH. Die Wendel wird für das Elektronenstoßheizen von Tunnelspitzen genutzt.

3.1.2 Analysekammer

In der Präparationskammer können die Proben- bzw. Spitzenträger über einen Greifarm auf einen längeren Transferstab gesetzt werden, der die Präparationsmit der Analysekammer verbindet (siehe Bild 3.1). In der Analysekammer ist ein Vierspitzen-STM (siehe auch nachfolgendes Kapitel 3.2) mit einem Probenstisch vorhanden. Der Probenstisch lässt sich über einen Kryostaten mittels Stickstoffkühlung auf -140°C und mittels Heliumkühlung auf -220°C kühlen (in Bild 3.1 STM-Kühlung genannt). Über zwei Greifarme können alle vier STM-Plätze mit Spitzenträger und der Probenstisch mit einem Probensträger bestückt werden. Über dem Vierspitzen-STM befindet sich ein SEM mit rein elektrostatischen Linsen zur Beobachtung der Probe. Es handelt sich um den Typ Nanofocus 50 der Staib GmbH (Schottkyemitter, maximale Elektronenenergie 10 kV, Durchmesser der Elektronensonde minimal 50 nm (Auflösung minimal ca. 100 nm), max. Betriebsdruck 1×10^{-9} mbar). Zum Ablegen von Proben- bzw. Spitzenträger gibt es in der Analysenkammer ein Parkkarussell. Über einen dritten Greifarm kann in einer Nebenkammer ein weiteres Parkkarussell genutzt werden.

3.2 Vierspitzen-STM

Das Vierspitzen-STM ist in seiner Grundkonstruktion ein kommerzielles Gerät der Omicron GmbH. Für den Gebrauch als Tunnelmikroskop wurde das Vierspitzen-STM durch C. A. Bobisch [47] und A. Banani [48] im Rahmen ihrer Promotionen umgebaut (zusätzliche Viton-Dämpfung und Piezoelemente).

3.2.1 Aufbau des Vierspitzen-STM

Grundlage des Vierpsitzen-STM bildet die Messbühne (vgl. Bild 3.3 und Bild 3.4), die aus mehreren dicken Stahlplatten besteht, die durch Viton voneinander getrennt sind. Das Viton entkoppelt die Stahlplatten vom Rest der UHV-Apparatur, sodass durch die Trägheit der schweren Stahlplatten eine gute Dämpfung gegenüber störenden Schwingungen erreicht wird. In der Mitte der Messbühne befindet sich der Probenstisch, der über ein Kupferband mit dem Kryostaten verbunden ist und sich hierdurch kühlen lässt (siehe Bild 3.3). Um den Probenstisch sind vier Spitzenbühnen gruppiert (siehe Bild 3.4), auf die Spitzenträger gesetzt werden können. Die Spitzenbühnen erlauben eine Grobpositionierung (kleinste Schrittweite 10 nm) der aufgesetzten Spitzen in alle drei Raumrichtungen mit den in Bild 3.4 gezeigten lateralen Arbeitsbereichen. Der gemeinsame Arbeitsbereich aller vier Spitzenbühnen (siehe Bild 3.4) beträgt in etwa $5 \times 5 \text{ mm}^2$ und gestattet eine flexible Positionierung der Spitzen auf der Probe.

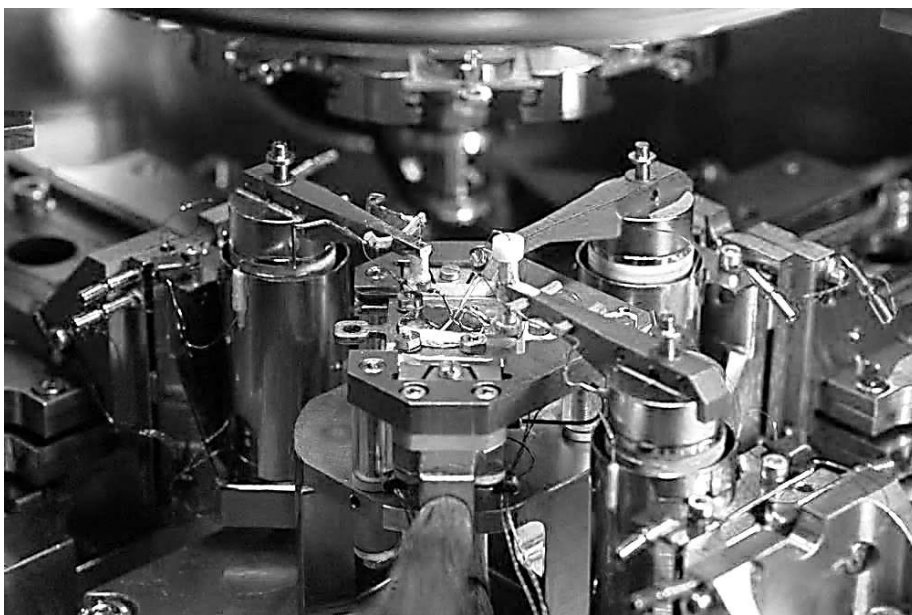


Bild 3.3| Detailaufnahme des Vierspitzen-STM. In der Mitte ist der Probenstisch mit einer eingesteckten Goldprobe zu sehen, der von drei Spitzenbühnen mit aufgesetzten Tunnelspitzen umgeben ist. Im Vordergrund (untere Mitte) befindet sich das Kupferband für die Kühlung des Probenstisches. Archivaufnahme der AG Prof. Möller.

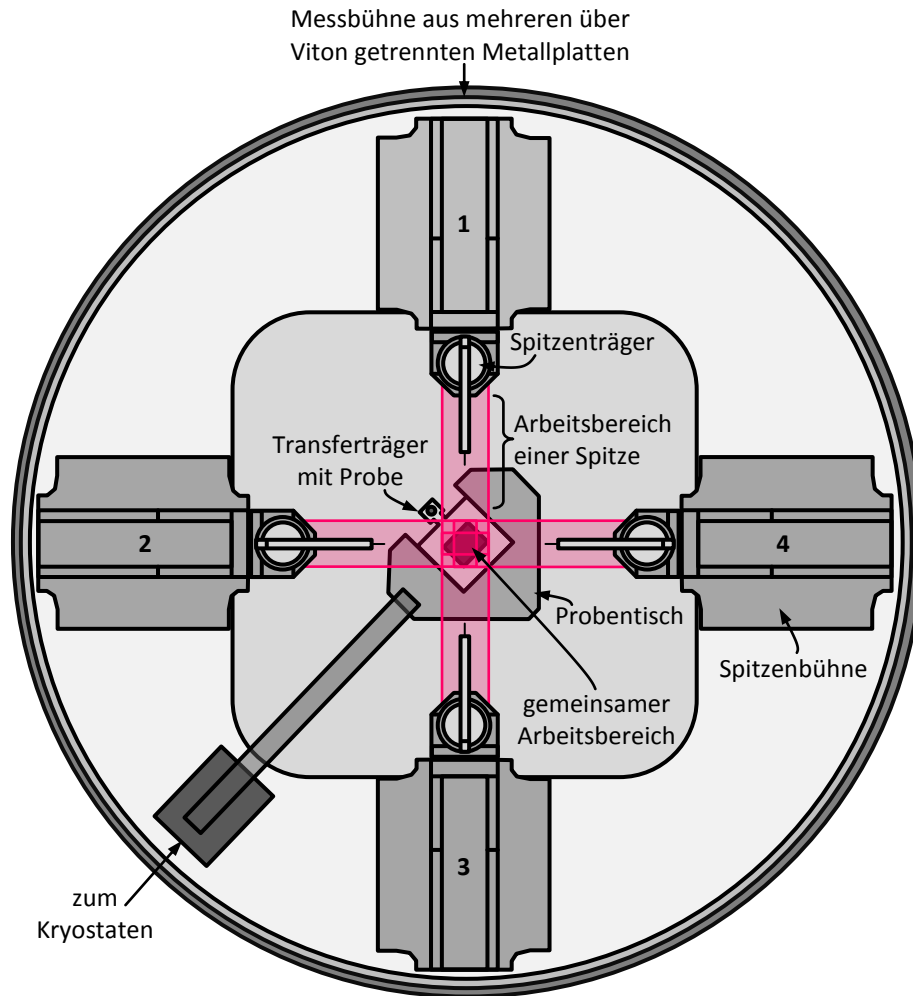


Bild 3.4| Aufsichtsskizze des Vierspitzen-STM. Um den kühlbaren Probestisch (Mitte, mit Kupferband als Wärmeleitung zum Kryostaten) sind vier Spitzenbühnen (1-4) verteilt, auf die Spitzenträger gesetzt werden können. Spitzenbühnen und Probestisch stehen auf der Messbühne, die aus mehreren Platten besteht, die zur Dämpfung durch Viton getrennt sind. Zeichnung nach [15].

3.2.2 Spitzenbühnen

Den Aufbau einer Spitzenbühne zeigt Bild 3.5. Sie setzt sich aus drei Fahrschlitzen zusammen: den Schlitten in x -Richtung (Bewegung vor- und zurück), den Schlitten in y -Richtung (Bewegung links und rechts) und den Schlitten in z -Richtung (Bewegung hinauf und herab). Der Schlitten in z -Richtung ist auch der Träger des Scanpiezos, der die Feinbewegung während des Rasterns ausführt. Zur Abschirmung elektrischer Störfelder des Scanpiezos ist dieser von einem Metallzylinder umgeben. Auf dem Scanpiezo ist eine Trägeraufnahme mit zwei Pins angebracht, auf dem Spitzenträger magnetisch haften können. Die Trägeraufnahme ist zugleich auch ein elektrischer Kontakt für den Träger. Zusätzlich sind am Metallzylinder zwei separate elektrische Kontakte in Form zweier Kontaktfedern angebracht. Insgesamt verfügt man daher über drei separate elektrische Kontakte für den Spitzenträger.

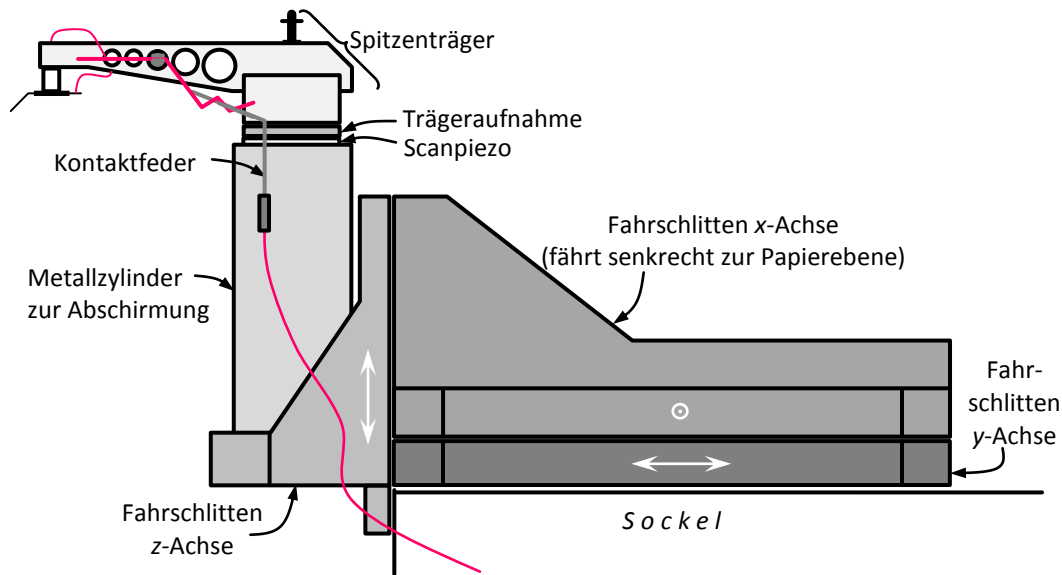


Bild 3.5 | Detailskizze einer Spitzenträger-Struktur. Der Spitzenträger kann auf den Scanpiezo aufgesteckt werden. Der Scanpiezo seinerseits liegt auf drei Fahrschlitten auf, die eine grobe Positionierung des Scanpiezos, und damit der Spitze des Spitzenträgers, ermöglichen. Zeichnung aus [15].

Die einzelnen Fahrschlitten sind folgendermaßen aufgebaut (siehe Bild 3.6a): Drei Piezomotoren, jeweils bestehend aus einem Scherpiezo mit einer aufgeklebten Stahlkugelhälfte, laufen auf drei Gleitflächen, wobei zwei Gleitflächen als Führungsschienen in Form eines Winkels und die dritte in Form einer glatten Platte ausgeführt sind. Durch die Drei-Punkt-Auflage wird eine einfache, gegen Kippen sichere Konfiguration erreicht. Beim x - und z -Fahrschlitten sind die Gleitflächen auf dem Fahrschlitten montiert und die Piezomotoren sind auf der Gegenfläche angebracht. Beim x -Fahrschlitten dient der y -Fahrschlitten als Gegenfläche, sodass auf dessen Oberseite die entsprechenden Piezomotoren angebracht sind. Auf der Unterseite des y -Fahrschlittens befinden sich die Piezomotoren für die y -Bewegung und im Sockel der Spitzenträger die Gleitflächen für den y -Fahrschlitten. Die Piezomotoren werden durch die Führungsgleitflächen entlang der gewünschten Bewegungsrichtung der Piezomotoren geführt (siehe Bild 3.6a). Die flache Gleitfläche gibt etwas Spiel, damit es zu keinem Verkeilen der Piezomotoren mit den drei Gleitflächen kommt. Über zwei Magnete mit Gegenstücken werden die Stahlkugeln mit einem gewissen Druck auf die Gleitflächen gepresst. Hierdurch haften die Piezomotoren auf den Gleitflächen selbst gegen die Schwerkraft (z. B. beim z -Fahrschlitten). Die Bewegung des Fahrschlittens erfolgt, indem sich die Piezomotoren langsam in die gewünschte Richtung bewegen und dabei den Schlitten mitziehen. Nach der maximalen Ausdehnung der Piezomotoren ziehen diese sich schnell zurück, sodass der Fahrschlitten durch seine Trägheit nicht folgen kann. So können die Fahrschlitten schrittweise bewegt werden. Die Feinbewegung der Spitzenträger erfolgt über eine piezokeramische Röhre – den Scanpiezo – mit atomarer Präzision.

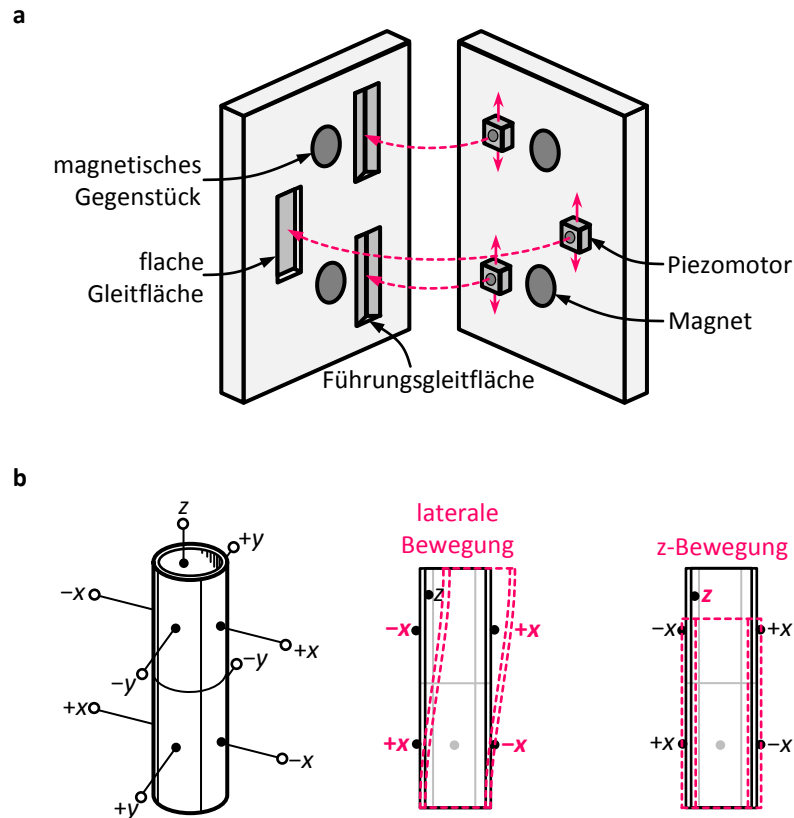


Bild 3.6 | Bewegung der Spitzenträger. (a) Für die Grobpositionierung der Tunnelspitze werden Fahr Schlitten benutzt. Sie werden bewegt, indem drei Piezomotoren auf drei Gleitflächen (eine flache Gleitfläche und zwei Führungsgleitflächen) laufen (Bewegung in Pfeilrichtung). (b) Für die Feinbewegung wird ein Scanpiezo benutzt: Links die Belegung der äußeren 8 Elektroden (x, y-Richtung) und der inneren Elektrode (z-Richtung) des Scanpiezos, rechts die Auslenkung (übertrieben) bei einer lateralen Bewegung und einer z-Bewegung.

Auf der äußeren Mantelfläche des Scanpiezos sind 8 Elektrodenflächen in Form zweier viergeteilter Ringe aufgebracht (siehe Bild 3.6b). Diese äußeren Elektroden dienen der feinen lateralen Bewegung der Tunnelspitze während des Rasterns (in Bild 3.6b als x- und y-Richtung bezeichnet). Für jede Richtung stehen vier Elektroden zur Verfügung, die sich paarweise untereinander auf dem Scanpiezo gegenüber stehen. Für jedes Elektrodenpaar wird das Piezosignal (mit der Anlagenmasse als Bezugspunkt) auf eine Elektrode positiv und auf die andere negativ angelegt (in Bild 3.6b mit + und – indiziert). Auf dem gegenüberliegenden Elektrodenpaar wird die Polarität vertauscht (siehe Bild 3.6b). Hierdurch wird bei der lateralen Bewegung des Scanpiezos ein Verkippen der Trägersaufnahme (siehe Bild 3.6b) und damit eine ungewollte z-Bewegung der Spitze verringert, die sich wegen des Spitzenträgers nicht zentrisch über dem Scanpiezo befindet (siehe Bild 3.5). Hierdurch mindert man Höhenartefakte in der Topographie. Auf der inneren Mantelfläche der Piezoröhre befindet sich eine einzige Elektrode, die bei Anlegen eines Spannungssignals je nach Vorzeichen des Spannungssignals zu einer Ausdehnung oder einem Zusammenziehen des Scanpiezos führt (siehe Bild 3.6b).

3.2.3 Spitzenträger

Für die elektrische Kontaktierung bei Mehrpunktmessungen werden einfache Spitzenträger der Omicron GmbH benutzt (siehe auch Bild 3.7a). Diese bestehen aus einer metallischen Basis mit eingeklebtem Magneten zum Haften an der Trägeraufnahme des Scanpiezos, an der ein langes Ärmchen aus Metall befestigt ist. Am Ende befindet sich eine schräge Öse mit einer Schraube, sodass man dort einen Metalldraht mit einer Spitze an seinem Ende einklemmen kann. Der Draht wird dabei so eingespannt, dass er mit der Probenoberfläche einen Winkel von etwa 45° einschließt. Über die Spitze kann ein Strom bis zum Kontakt an der Trägeraufnahme geführt werden. Ein Greifpin an der Oberseite des Ärmchens erlaubt den Austausch des Spitzenträgers im UHV über einen Greifarm.

Für den Gebrauch als Tunnelspitzenträger haben sich Omicron-Träger als ungeeignet erwiesen, da sie während des Rasterns durch schnelle z-Bewegungen des Scanpiezos zum Schwingen bei etwa 400 Hz angeregt werden (siehe auch [47] und [48]). Gelöst wurde dieses Problem durch eine Aufspaltung der z-Bewegung: Die langsame z-Bewegung bis etwa 1 Hz, z. B. zum Ausgleich der Probenneigung, wird durch den Scanpiezo ausgeführt, schnellere Bewegungen, z. B. zum Ausweichen atomarer Stufen, werden durch einen zusätzlichen z-Piezo am Spitzenträger bewirkt (siehe auch Bild 3.7b). Unter dem z-Piezo ist eine Kanüle angeklebt, in die eine entsprechend gebogene Tunnelspitze eingeklemmt werden kann. Als Bezugsmasse für den z-Piezo dient der Träger und damit verbunden der auf Masse gelegte Kontakt an der Trägeraufnahme.

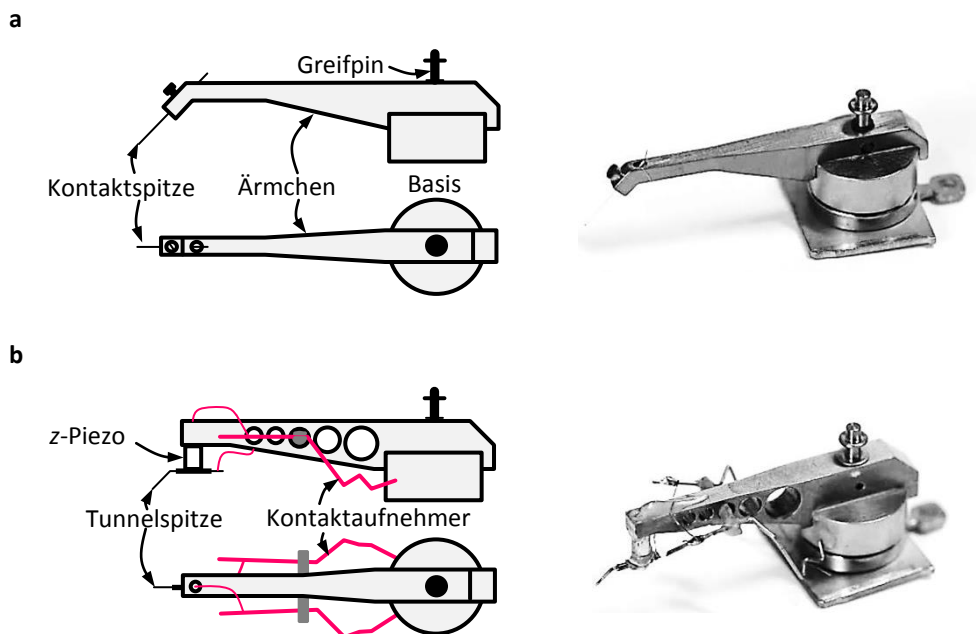


Bild 3.7 | Spitzenträger. Schematischer Aufbau (Auf- und Seitenansicht) und Photographie eines Kontaktträgers (Omicron GmbH, **a**) und eines Tunnelspitzenträgers (Selbstbau, **b**). Bild aus [15].

Für das z-Piezo-Signal sowie für das Tunnelstromsignal werden zwei weitere, separate Anschlüsse benötigt. Hierfür wurden am metallischen Abschirmzylinder des Scanpiezos elektrisch isoliert zwei separate Kontaktfedern als elektrische Kontakte angeklebt. Am Tunnelspitzenträger sind zwei Kontaktaufnehmer angebracht, in die sich die Kontaktfedern hineinlegen, sobald der Tunnelspitzenträger auf die Trägeraufnahme gesteckt wird (vgl. Bild 3.5). Die Kanüle für die Tunnelspitze sowie die innere Elektrode des z-Piezos sind über Kabel mit den entsprechenden Kontaktaufnehmern verbunden.

Der Apex der Tunnelspitze ist sehr empfindlich, insbesondere bei physischen Berührungen z. B. mit der Probenoberfläche, die zur Zerstörung der Tunnelspitze führen können. Es ist daher nötig, die Tunnelspitze zusammen mit ihrem Träger der Probenoberfläche in geeigneter Weise anzunähern. Die Annäherungsgeschwindigkeit der Spitze muss so eingestellt sein, dass die Regelung reagieren kann, wenn die Spitze in den Tunnelabstand zur Probe kommt, um einen physischen Kontakt zu verhindern. Die Spitze wird über den z-Fahrschlitten und den Scanpiezo folgendermaßen bewegt (siehe Bild 3.8): Der Scanpiezo ist in z-Richtung vollständig ausgedehnt, sodass die Spitze möglichst weit von der Probe entfernt ist. Dann zieht sich der Scanpiezo zusammen und die Spitze nähert sich der Probe an. Wird kein Tunnelstrom bzw. kein Tunnelkontakt bis zur tiefsten z-Auslenkung des Scanpiezos gefunden, dehnt sich der Scanpiezo bis zu seiner Ausgangstellung wieder aus. Der z-Fahrschlitten bewegt danach den Scanpiezo mit der Tunnelspitze schrittweise herunter, bis die Spitze fast an ihrer vorherigen tiefsten z-Position ist. Von dort aus „sucht“ der Scanpiezo erneut mit der Spitze die Probenoberfläche. Die wechselnde Bewegung der Spitze durch Scanpiezo und z-Fahrschlitten wird solange wiederholt, bis ein Tunnelstrom bzw. ein Tunnelkontakt gefunden wird.

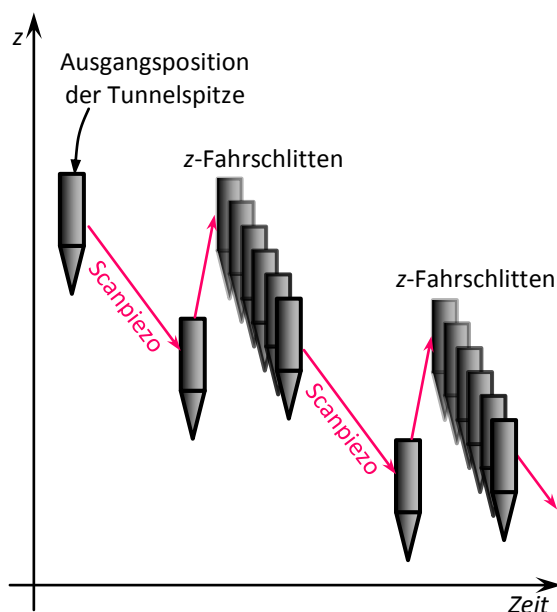


Bild 3.8| Annäherung einer Tunnelspitze an eine Probe. Der Scanpiezo „sucht“ in z-Richtung mit der Tunnelspitze einen Tunnelkontakt. Wird kein Tunnelkontakt gefunden, wird die Spitze zurück zur Ausgangsposition gefahren. Die Tunnelspitze wird mittels des z-Fahrschlittens schrittweise annähernd auf die vorherige, tiefste Position gefahren. Von dort aus „sucht“ der Scanpiezo erneut den Tunnelkontakt. Dies wird solange wiederholt, bis der Tunnelkontakt zur Probe gefunden ist.

3.2.4 Datenerfassung und Datenverarbeitung

Bild 3.9 zeigt ein Flussdiagramm für die Steuerung des STM im normalen STM-Betrieb. Zentrales Element der STM-Steuerung ist ein Computer (Ubuntu-Betriebssystem) mit dem freien Programm »Gnome X Scanning Microscopy« (kurz GXSM [49]). Es ist u. a. als graphische Schnittstelle für die Steuerung von Rastertunnelmikroskopen konzipiert und ermöglicht eine komfortable Kontrolle und Einstellung aller für STM-Messungen wichtigen Parameter wie zum Beispiel Solltunnelstrom, Tunnelspannung, Scangröße, Scanauflösung, Regelgeschwindigkeit, Scangeschwindigkeit oder Kalibrierungskonstanten. Daneben bietet es eine einfache Einstellung wichtiger Messroutinen an wie z. B. I - V -Kennlinien, Tunnelspektren oder z -Spektroskopie. Über eine USB-Schnittstelle greift das GXSM direkt auf eine Messkarte mit einem digitalen Signalprozessor (DSP) zu.

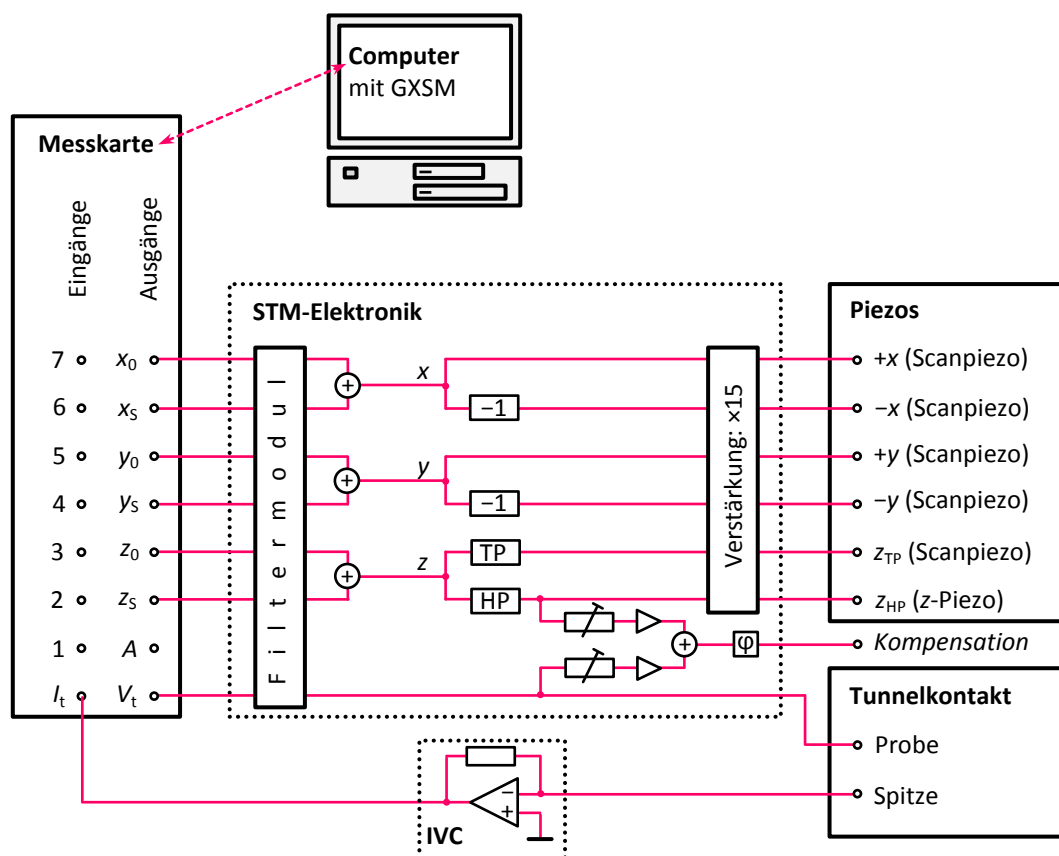


Bild 3.9| Flussdiagramm der STM-Steuerung. Von einem Computer aus wird eine Messkarte gesteuert. Sie ermöglicht die Ansteuerung der Piezos (x_0 , x_s , y_0 , y_s , z_0 , z_s) sowie die Einstellung der Tunnelspannung V_t . Über eine STM Elektronik werden die Signale gefiltert und weiterverarbeitet. Die gefilterte Tunnelspannung wird direkt an der Probe angeschlossen. Über die Spitze wird der Tunnelkontakt zur Probe mittels eines Strom-Spannung-Wandlers (IVC) geschlossen und der Tunnelstrom gemessen. Das Diagramm wurde zusammen mit D. Utzat erstellt.

Die Messkarte selbst bildet einen eigenen Rechner, auf dem autark ein Programm zur Steuerung und Regelung des STM läuft. Die Parameter werden von dem GXSM in das DSP-Programm gegeben. Da das DSP-Programm unabhängig arbeiten kann, ist es unabhängig von möglichen Abstürzen des GXSM, sodass eine Zerstörung der Tunnelspitze vermieden wird. Die Messkarte bietet je acht Ein- und Ausgänge mit einem Arbeitsbereich von ± 10 V und einer Auflösung von 16 Bit. Die Ausgänge werden für folgende Signale benutzt:

- lateraler Versatz der Tunnelspitze (drei Ausgänge: x_0, y_0, z_0)
- Scanbereich der Tunnelspitze (drei Ausgänge: x_s, y_s, z_s)
- Tunnelspannung V_t
- Steuersignal für den Annäherungsprozess (in Bild 3.9 als A bezeichnet)

Die Signale für die Positionierung der Tunnelspitze sowie für die Tunnelspannung werden zunächst in eine modular aufgebaute Elektronik eingespeist (in Bild 3.9 als STM-Elektronik bezeichnet). Dort werden die Signale gefiltert. Anschließend werden die jeweiligen Signalkomponenten für den Versatz und den Scanbereich addiert (zum Beispiel x_0 und x_s werden zu x addiert). Aus den Signalen für x und y werden danach zusätzlich invertierte Signale erstellt, sodass man insgesamt vier Signale für die laterale Bewegung des Scaniezos erhält, nämlich $+x, -x, +y$ und $-y$ (siehe hierzu auch Bild 3.6b). Wie bereits in Kapitel 3.2.3 erläutert, muss das z -Signal aufgeteilt werden in ein langsames Signal (tiefe Frequenzen bis 1 Hz) für den Scaniezo und ein schnelles Signal (hohe Frequenzen ab 1 Hz) für den z -Piezo am Spitzenträger. Dies wird erreicht, indem das z -Signal jeweils durch einen Tiefpass (tiefe Frequenzen, Signal z_{TP} für den Scaniezo) und durch einen Hochpass (hohe Frequenzen, Signal z_{HP} für den z -Piezo) gefiltert werden. Alle Piezosignale werden anschließend noch um den Faktor 15 verstärkt und zu den Piezokontakten geleitet.

Die Tunnelspannung wird nach dem Filtern direkt an die Probe angeschlossen. Der Tunnelkontakt wird geschlossen, indem man die Tunnelspitze über einen Strom-Spannungs-Wandler (engl. *current(I)-to-voltage(V)-converter*, kurz IVC) mit der Masse verbindet. Die Tunnelspannung ist wie in Bild 2.2 definiert: Bei einer positiven Spannung fließt der Nettoelektronenfluss von der Spitze in die Probe (Tunneln in unbesetzte Zustände der Probe). Bei negativer Tunnelspannung fließt der Nettotunnelstrom von der Probe in die Spitze (Tunneln aus besetzten Zuständen der Probe). Mittels des IVC wird der Tunnelstrom erfasst und in ein Spannungssignal gewandelt (Konversionsfaktor 10^9 V/A), das an einen Eingang der Messkarte geleitet wird. Die anderen sieben Eingänge der Messkarte können zur Aufzeichnung weiterer Signale wie z. B. dem Potentialsignal bei der STP oder I - V -Kennlinien bei Mehrpunktmessungen benutzt werden.

Auf der UHV-Seite verlaufen die Kabel ungeschirmt, sodass es zu einem kapazitiven elektrischen Übersprechen durch andere Signale auf das Tunnelstromkabel kommen kann. Da sich vor allem die Signale für z und für die Tunnelspannung V_t schnell verändern, verursachen hauptsächlich diese beiden Signale das kapazitive Übersprechen. Man begegnet dieser inhärenten Störung durch ein

Kompensationskabel, auf das man ein Kompensationssignal einspeist, das so kapazitiv auf das Tunnelstromkabel überspricht, dass die anderen Störungen kompensiert werden. Hierfür zweigt man das z -Signal und das Tunnelspannungssignal ab (siehe Bild 3.9) und führt beide Signale jeweils über einen einstellbaren Verstärker. Danach werden beide Signale miteinander addiert und die Phase der Signale um 180° gedreht, sodass das kapazitive Übersprechen des Kompensationssignals gegenphasig zu dem Übersprechen des z -Signals und des Tunnelspannungssignals steht. Über die Verstärker lassen sich die Amplituden der in das Kompensationskabel eingespeisten Signale so einstellen, dass das kapazitive Übersprechen von z und V_t möglichst komplett ausgeglichen wird.

Die für die STP-Experimente benutzte elektronische Regelung zeigt Bild 3.10, wobei die STP tatsächlich etwas anders arbeitet, als das einfache Schema in Kapitel 2.2.1 vorgibt (vgl. Bild 2.6): Die Tunnelspitze befindet sich wie im normalen STM-Modus durch den IVC auf dem Potential der Masse. Die Regelung des Abstandes Spitze-Probe erfolgt wie im normalen STM-Betrieb (siehe Bild 3.10, Regelkreis für z): Das Tunnelstromsignal vom IVC wird über einen Gleichrichter G gleichgerichtet, sodass auch Wechselströme verarbeitet werden können.

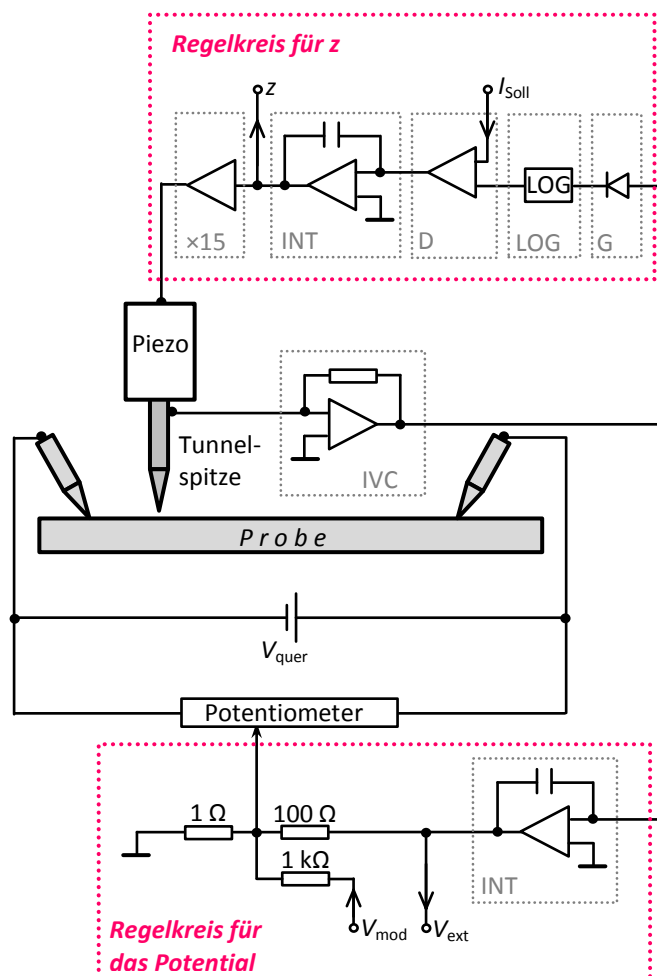


Bild 3.10| Elektrische Regelung während einer STP-Messung. Der Regelkreis für z hält den Wechselstromanteil des Tunnelstroms konstant. Der Regelkreis für das Potential hält den Mittelwert des Tunnelstroms für den Brückenabgleich auf null. Schema aus [28]. Die Abkürzungen haben folgende Bedeutung:

INT	Integrator
D	Differenzbildner
LOG	logarithm. Verstärker
G	Gleichrichter
IVC	Strom-Spannungs-Wandler
I_{Soll}	Sollwert für den Tunnelstrom
z	Topographiesignal
V_{ext}	Ausgleichsspannung für das Potentiometer
V_{mod}	Modulationsspannung

Da der Tunnelstrom I_t exponentiell vom Tunnelabstand d und damit von der Höhe z der Tunnelspitze abhängt, wird das Tunnelstromsignal nach dem Gleichrichten über einen logarithmischen Verstärker linearisiert, um es im Regelkreis einfacher weiterverarbeiten zu können. Anschließend bildet ein Differenzbildner die Differenz zu einem vorgegebenen Sollwert I_{Soll} für den Tunnelstrom. Die Differenz wird in einen Integrator gespeist, der das Signal integriert. Dieses Signal wird eigentlich noch in der STM-Elektronik aufgespalten (Bild 3.9) und mit einem Faktor 15 verstärkt und an den Scan- und den z -Piezo gegeben. In Bild 3.10 wurde dieser Schritt vereinfacht, indem ein z -Signal verstärkt und an ein einziges Piezoelement geleitet wird. Dies geschieht so lange, bis die Differenz zwischen I_{Soll} und I_t null wird und der Integrator kein Signal mehr zum bestehenden z -Signal aufintegrieren kann.

Bei der Potentialregelung wird das Tunnelstromsignal direkt integriert, sodass nur der Gleichstromanteil registriert wird. Das Signal, das der Integrator weitergibt, ist die externe Spannung V_{ext} . Über den Schleifkontakt wird V_{ext} an das Potentiometer geleitet, das mit der Querspannung und den Kontaktspitzen verbunden ist. Ist die Brücke nicht abgeglichen, d. h. es fließt ein Gleichstrom über die Tunnelspitze ab, verändert der Integrator V_{ext} so lange, bis der Gleichstrom über die Tunnelspitze verschwindet. Da für die Abstandsregelung der Tunnelspitze eine Wechselspannung V_{mod} benötigt wird, wird V_{mod} über den Schleifkontakt des Potentiometers eingespeist, wobei die Amplitude von V_{mod} im Tunnelkontakt einige mV beträgt. Im zeitlichen Mittel hebt sich V_{mod} auf, sodass die Potentialregelung V_{mod} nicht registriert. Der Regelkreis für das Potential arbeitet etwa 10-mal langsamer als die Regelung für z , damit die beiden Regelkreise einander nicht stören [28]. Um der Potentialregelung genug Zeit für die Integration des Tunnelstroms einzuräumen, wird die Scangeschwindigkeit auf etwa $\frac{1}{3}$ des Werts im normalen STM-Betrieb gedrosselt.

Die Datenerfassung für STM und STP inklusive I - V -Kennlinien und Tunnelspektren übernimmt das Programm GXSM. Für die Datenauswertung der STM- und STP-Daten wird das kostenfreie Programm »WSxM« (siehe auch [50], Version 5.1) der Firma Nanotec Electrónica S.L. benutzt. Für die Auswertung von Datensätzen, Profillinien und I - V -Kennlinien wurde das Programm Origin 2015 der Firma Origin Lab benutzt. Beide Programme sind für den Einsatz auf dem Betriebssystem Windows der Microsoft Corp. entwickelt worden.

Zur Kalibrierung der lateralen Auflösung des Tunnelmikroskops wird ein Silicium(Si)-Wafer benutzt, dessen Oberfläche eine (111)-Orientierung aufweist (siehe Bild 3.11a). Auf der Oberfläche wird eine (7×7)-Rekonstruktion präpariert, deren Einheitszelle eine Gitterkonstante von etwa 2.69 nm hat [51]. Da diese Rekonstruktion durch das Tunnelmikroskop recht einfach abgebildet werden kann (siehe Bild 3.11b), wird sie zur Kalibrierung der lateralen Bewegung (x - und y -Richtung) der Tunnelspitze benutzt. Auf der Si-Oberfläche kann auch eine Stufung auftreten, wenn der Schnitt für die (111)-Oberfläche leicht fehlgeleitet ist. Die Höhe von Einfachstufen beträgt etwa 310 pm auf der Si(111)-Oberfläche [51], sodass mittels der Stufenhöhe auch eine Kalibrierung der vertikalen Auflösung des STM erfolgen kann.

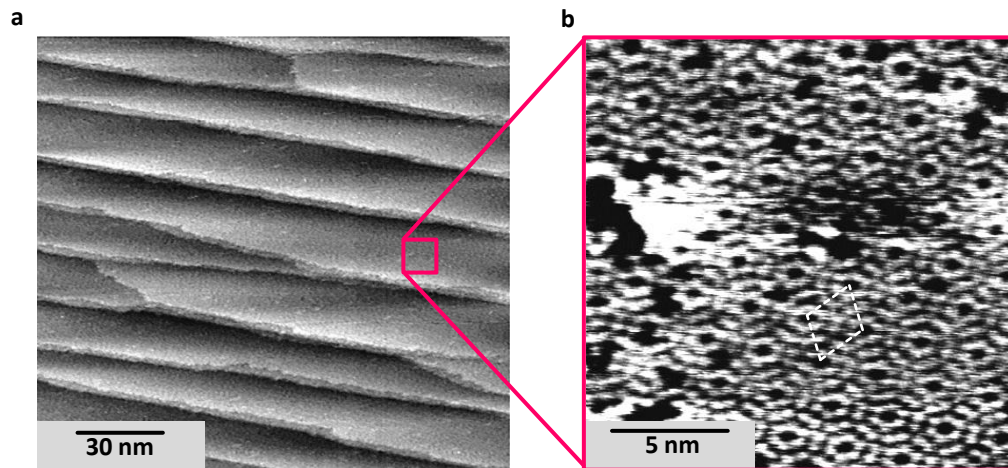


Bild 3.11 | STM-Aufnahme einer Si(111)-Oberfläche. (a) Topographie der Si(111)-Oberfläche ($V_t = 1.3 \text{ V}$, $I_t = 50 \text{ pA}$, $170 \times 170 \text{ nm}^2$). Der Kristall hat eine leichte Fehlneigung entlang der (111)-Oberfläche, sodass sich Terrassen auf der Oberfläche zeigen. (b) Ausschnitt einer Terrassenoberfläche ($V_t = 0.6 \text{ V}$, $I_t = 50 \text{ pA}$, $15 \times 15 \text{ nm}^2$). Man erkennt die hexagonale Struktur der (7x7)-Rekonstruktion, wobei der Verlauf einer Einheitszelle graphisch hervorgehoben wurde. Archiv-aufnahmen der AG Prof. Möller.

Der z-Kalibrierungsfaktor ist bei den Spitzenträgern verschieden, vermutlich auf Grund einer leichten, für jeden Spitzenträger unterschiedlichen Verkippung durch den Scanpiezo beim Rastern. Der Kalibrierungsfaktor wird daher für jede Tunnelspitze einzeln ermittelt und später im WSxM-Programm für die Aufnahmen eingestellt. Da die Tunnelspitzen meist auf einer Gold(Au)-Probe (Au(111)-Oberfläche, siehe Bild 3.12) nachpräpariert werden, werden statt der Si(111)-Stufen die Stufen auf der Au(111)-Oberfläche für die Kalibrierungsaufnahmen genutzt. Dabei beträgt die Höhe einer Stufe auf der Au(111)-Oberfläche 235 pm [52]. Die Kalibrierung der Piezos ist praktisch unabhängig von der über den STM-Kryostaten eingestellten Probentemperatur, da der Scanpiezo und der z-Piezo von der Probe thermisch nahezu entkoppelt sind.



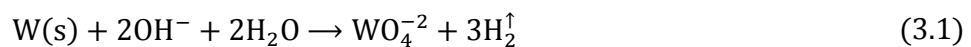
Bild 3.12 | STM-Aufnahme einer Au(111)-Oberfläche. Dreidimensionale Darstellung der Topographie einer Au(111) mit leichter Fehlneigung ($V_t = 0.3 \text{ V}$, $I_t = 5 \text{ pA}$, $400 \times 400 \text{ nm}^2$, Archivaufnahme).

3.3 Spitzenpräparation

Für den Einsatz im Vierspitzen-STM ist die makroskopische Form der Tunnel- und Kontaktspitzen äußerst wichtig, da man im Rahmen der STP und der MPM die Positionen der Spitzenapizes möglichst genau kennen muss, um z. B. die lokale Stromdichte am Ort der Tunnelspitze sicher abschätzen zu können.

3.3.1 Präparation von Wolframspitzen

Für Tunnelspitzen wird Wolfram (W) als 0.38 mm dicker Draht verwendet (Reinheit 99.95 %; Goodfellow GmbH). Vorteilhaft hierbei ist die Steifheit des Materials, die in Verbindung mit der relativ großen Dicke des W-Drahts für eine stabile Konfiguration der (relativ langen) Tunnelspitze im Spitzenhalter (vgl. Bild 3.7b) sorgt. Um die eigentliche Tunnelspitze herzustellen, taucht man den W-Draht etwa vier Durchmesser tief in eine 3-molare Natriumhydroxid(NaOH)-Lösung und verbindet ihn über eine Spannungsquelle mit einer Platin(Pt)-Elektrode, die ebenfalls in die NaOH-Lösung eingetaucht ist (vgl. Bild 3.13). Wird zwischen dem W-Draht und der Pt-Elektrode eine Spannung von $> 1.43 \text{ V}$ angelegt, erzwingt man eine Oxidation der W-Oberfläche und Wasserstoffabscheidung an der Pt-Elektrode, sodass als Bruttoreaktionsgleichung [53]



folgt. Das WO_4^{2-} -Ion (bzw. in wässriger Lösung die korrespondierende Wolframsäure) sinkt während des Ätzvorgangs aufgrund der Schwerkraft in der Lösung herab. Wenn der Wolframdraht senkrecht zur Lösungsoberfläche steht, wird nur nahe am Flüssigkeitsmeniskus die W-Oberfläche durch den Ätzvorgang abgetragen, da die Wolframsäure wie ein schützender Film entlang des Drahtendes absinkt und daher den Ätzvorgang dort deutlich verringert. Hierdurch schnürt sich die Stelle am Meniskus immer weiter ein, während der eingetauchte Rest des Drahtes wie ein Gewicht an der Ätzstelle hängt (siehe Bild 3.14a).

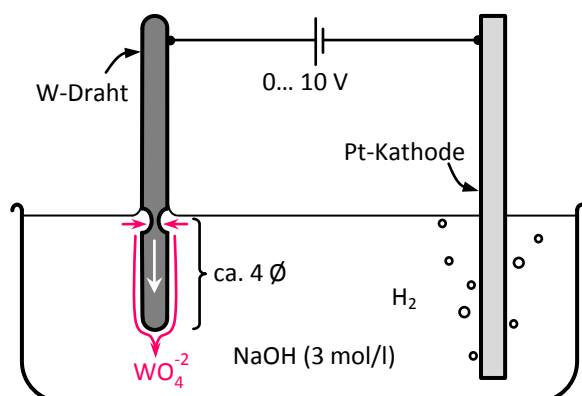


Bild 3.13 | Schema des elektrochemischen Ätzens eines Wolframdrahts. Zwischen einer Pt-Elektrode und einem W-Draht wird eine Spannung von mindestens 1.43 V angelegt, sodass an der W-Oberfläche eine Redoxreaktion erzwungen wird. Zeichnung nach [15].

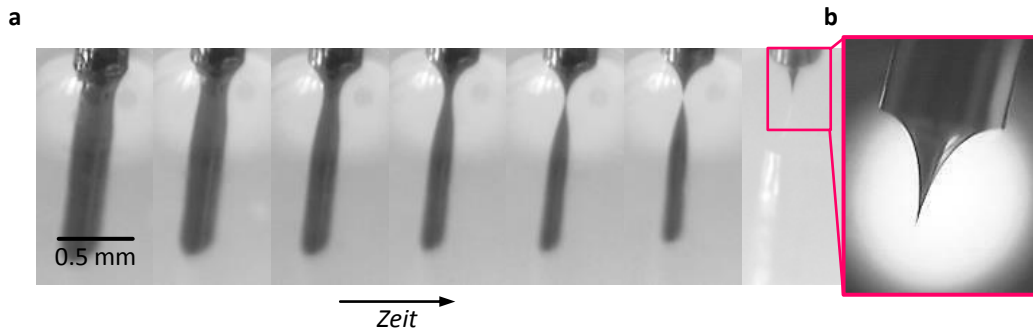


Bild 3.14 | Ätzworgang an einer Wolframspitze. (a) Zeitlicher Ablauf beim Ätzen einer Wolframspitze. (b) Lichtmikroskopische Aufnahme der fertigen Wolframspitze. Darstellung aus [15].

Ist der Draht am Meniskus dünn genug, reißt das unter Stück des Drahtes ab und die Tunnelspitze ist gebildet. Eine in die Spannungsquelle integrierte Elektronik registriert die starke Stromänderung während des Losreißens und schaltet die Spannungsquelle ab, um ein Weiterätzen der Tunnelspitze zu vermeiden. Die geätzte Spitze wird mit entionisiertem Wasser gereinigt und unter einem Lichtmikroskop begutachtet, ob der Apex scharf und das Verhältnis von Apexlänge zu Drahtdurchmesser stimmig ist (siehe Bild 3.14b). Da die Tunnelspitze unter einem Winkel von 45° auf die zu untersuchende Probe trifft, muss der Spitzenapex lang genug sein, um näher an der Probe zu sein als der Schaft der Spitze. Außerdem sollte die Position des Spitzenapex auch im SEM sichtbar sein, wobei das SEM die Spitze nur senkrecht von oben abbildet. Der Spitzenapex sollte daher von oben gesehen etwas über den oberen Teil des Spitzenschaftes hervorragen. In Bild 3.15 sind die begrenzenden Kanten des Spitzenschaftes als gestrichelte Linien dargestellt, wobei man in der Praxis bemüht ist, die Spitze deutlich länger als diese Kanten zu machen.

Der Wolframdraht mit der Tunnelspitze wird anschließend so geknickt, dass man ihn, so wie in Bild 3.7b gezeigt, in die Kanüle des Tunnelspitzenträgers klemmen kann. Anschließend wird der Träger in die Präparationskammer eingeschleust und auf 100°C geheizt, um Adsorbate von ihm zu entfernen.

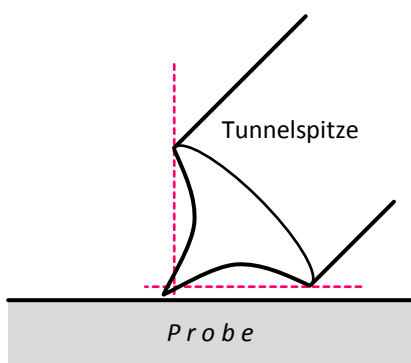
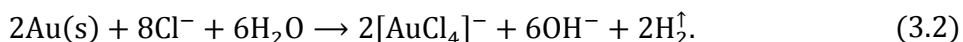


Bild 3.15 | Mindestmaße einer Tunnelspitze. Eine Tunnelspitze muss für den Einsatz am Vierspitzen-STM mindestens über die obere und untere Kante des Spitzenschaftes herausragen (gestrichelte Linien).

Anschließend wird die Tunnelspitze mittels Elektronenstoß geheizt. Hierfür wird die Spitze in ein Filament eingefädelt (Typ Xenophot 64634 HLX EFR der Osram GmbH), sodass auch der Schaft ein paar Windungen tief in die Wendel hinein ragt. Anschließend legt man zwischen Wendel und Spitze eine Hochspannung an (bis 2 kV) und heizt die Wendel durch einen elektrischen Strom so weit auf, dass es zur Thermoemission von Elektronen aus der Wendel kommt, die durch die Hochspannung zu einem kleinen Emissionsstrom von 0.1 mA auf die Spitze führen. Danach wird über den Wendelstrom die Thermoemission so weit erhöht, dass über das Bombardement mit Elektronen der Schaft und damit auch der Apex der Tunnelspitze zum Glühen gebracht werden. Hierdurch lösen sich vom Apex störende Oxidschichten. Danach wird die Tunnelspitze in die Analyse-kammer transferiert und kann dort gegebenenfalls nachpräpariert werden. Wenn die Spitze keine gute Abbildungsqualität im STM-Betrieb zeigt, können die Tunnelbedingungen durch Spannungspulse oder kurzes Eintauchen in die Probe verbessert werden. Eine andere Möglichkeit stellt die Feldemission dar, bei der eine hohe Tunnelspannung von etwa $V_t = +45\text{ V}$ und ein Tunnelstrom von etwa 10 nA eingestellt werden. Die Regelung wird abgestellt und die Tunnelspannung weiter erhöht, bis ein Strom von einigen μA von der Spitze in die Probe fließt. Durch den hohen Feldemissionsstrom finden Elektromigrationsprozesse am Spitzenapex statt, die zu einer mechanischen wie elektrischen Stabilisierung der Tunnelbedingungen führen können.

3.3.2 Präparation von Goldspitzen

Für Kontaktspitzen wird ein ca. 0.1 mm dicker Gold(Au)-Draht benutzt, da Gold weicher als Wolfram ist und die Probenoberfläche beim Kontaktieren schont. Für die Präparation wird der Au-Draht analog zum W-Draht geätzt und begutachtet (vgl. Bild 3.13), in den Kontaktspitzenenträger eingeklemmt (vgl. Bild 3.7a), eingeschleust und durch Heizen auf 100 °C von Adsorbaten befreit. Elektronenstoßheizen und die Nachpräparation im Tunnelmikroskop entfallen. Als Ätzmittel wird eine Lösung aus Kaliumchlorid (KCl) oder Natriumchlorid (NaCl) mit einer Konzentration von 4 mol/l verwendet. Liegt zwischen Pt-Elektrode und Au-Draht eine Spannung von etwas mehr als 1 V an [54], ergibt sich sowohl für die KCl- als auch für die NaCl-Lösung folgende Bruttoreaktionsgleichung:



Die $[\text{AuCl}_4]^-$ -Ionen sinken als schützender Film entlang des eingetauchten Drahtes ab wie beim Ätzen vom Wolfram. Dies ist auch mit bloßem Auge sichtbar, da die $[\text{AuCl}_4]^-$ -Ionen als wässrige Lösung eine hellgelbe Farbe haben. Die Reaktion (3.2) verbraucht viele Cl^- -Ionen in der Nähe des Golddrahtes. Sinkt die Konzentration von Cl^- bei zu hoher Spannung (hier ab ca. 2.5 V) zu stark ab, werden dunkle Goldoxide an der Drahtoberfläche gebildet [54]. Diese Goldoxide wirken passivierend bzw. isolierend und sollten daher vermieden werden.

3.4 Probenpräparation

Die Experimente werden unter UHV-Bedingungen (Druck $< 10^{-8}$ mbar) durchgeführt, um eine möglichst reine, reproduzierbare und gut definierte Oberfläche zu erhalten. Auch im UHV gibt es Restgasmoleküle, die in Abhängigkeit von Zeit und Druck die Oberfläche belegen. Diese Problematik wird quantifiziert durch die sogenannte Monozeit, die angibt, nach welcher Zeitspanne eine reine Oberfläche durch eine Monolage des Restgases belegt wird. Nimmt man eine Haftwahrscheinlichkeit (engl. *sticking coefficient*) von eins an, beträgt die Monozeit bei einem Druck von 1×10^{-9} mbar etwa 15 min und bei 1×10^{-11} mbar bereits 30 h. Die Probenpräparation sollte daher möglichst bei einem niedrigen Kammerdruck und innerhalb einer kurzen Zeitspanne erfolgen.

3.4.1 Probenhalter

Für Einkristallproben (z. B. Au(111)-Kristall) werden einfache Halter benutzt, bei denen der Kristall über Manschetten oder Bügel am Halter festgeschraubt wird. Für die Präparation von Halbleiterproben wie z. B. Silicium wird dagegen ein etwas komplizierter Halter benötigt, bei dem man einen Strom direkt durch die Probe leiten kann. Bild 3.16 zeigt den in der AG Prof. Möller von C. A. Bobisch [47] und A. Banani [48] entwickelten Probenhalter für das Vierspitzen-STM. Der Halter wurde so konstruiert, dass sich keine Schrauben und Halterungen über dem Niveau der Probe befinden. Bild 3.16a zeigt einen schematischen Querschnitt des Probenhalters. Auf die zum Transfersystem von Omicron kompatible Grundplatte aus Molybdän sind zwei Molybdänbügel verschraubt. Zwischen den Bügeln kann man die Probe mittels zweier in die Bügel integrierten Tantalfedern einspannen, die der Probe bei Erwärmung auch etwas Ausdehnung erlauben. Vorteil von Molybdän und Tantal ist ihr niedriger Dampfdruck und ihre hohe Formbeständigkeit bis etwa 2000 °C.

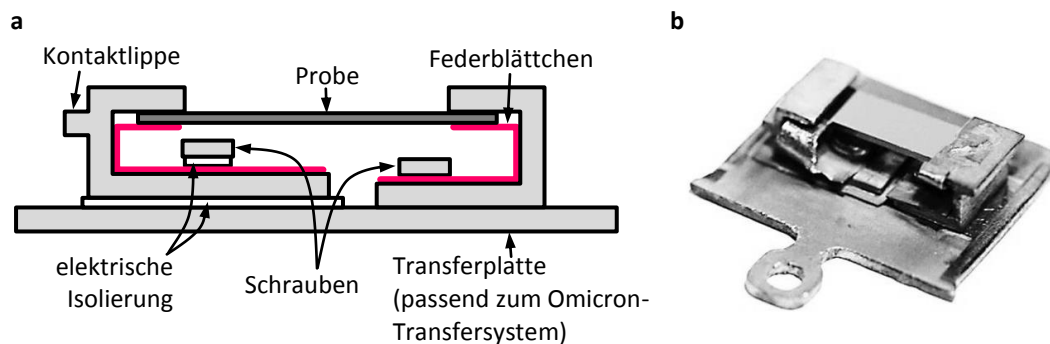


Bild 3.16 | Probenhalter für Halbleiterproben. (a) Schematischer Querschnitt des Probenhalters. Vom isolierten linken Flügel kann man einen Strom durch die Probe zum rechten, mit der Probenplatte verbundenen Bügel führen. (b) Photographie des Probenhalters. Darstellung aus [15].

Der linke Bügel ist gegenüber der Grundplatte des Probenhalters elektrisch isoliert und besitzt eine Kontaktlippe. Am Präzisionsmanipulator befindet sich ein Stromkontakt, der sich beim Einschieben der Probe in den Manipulator auf die Kontaktlippe schiebt. Hierdurch kann man einen Strom vom Kontakt durch die Probe auf die Grundplatte des Probenhalters leiten. Durch das Heizen der Probe mit einem elektrischen Strom durch die Probe selbst (Direktstromheizung) erreicht man recht leicht Temperaturen von über 1300 °C auf der Oberfläche von Halbleiterproben. Über das in den Präzisionsmanipulator integrierte Heizfilament lässt sich die in den Probenhalter eingespannte Probe auf bis zu 600 °C heizen. Dies ist insofern wichtig, da sich manche Halbleiterproben bei Raumtemperatur wegen ihres hohen Widerstands nicht durch Direktstrom beheizen lassen, sondern erst durch die Filamentheizung aufgewärmt werden müssen. Über die Direktstromheizung lassen sich auf den Halbleiterproben störende Oxidschichten gut entfernen und man kann die Oberfläche der Proben thermisch so bearbeiten, dass sich Oberflächenrekonstruktionen herstellen lassen.

3.4.2 Sputtern

Neben der rein thermischen Reinigung der Probe durch eine Filament- oder Direktstromheizung wird in dieser Arbeit eine weitere Methode benutzt: Die Kathodenzerstäubung bzw. das Sputtern [55] (von engl. *to sputter* »brutzeln, herausprudeln, zerstäuben«). Beim Sputtern wird ein Ionenstrahl (hier aus dem Edelgas Argon) auf die geerdete Probe gerichtet. Die Argonionen treffen auf die Probenoberfläche und dringen von dort aus in die Probe ein. Dabei wird auch ein Teil der Oberflächenatome von der Oberfläche zerstäubt und mit ihnen Oberflächenverunreinigung entfernt. Nach dem Sputtern ist die Oberfläche durch Sputtergrübchen uneben. Durch Heizen kann die Probe ausgeheilt werden, d. h., die Probenoberfläche nivelliert sich und vergrabene Argonionen werden aus der Probe diffundiert. Man wiederholt diese Prozedur aus Sputtern und Ausheilen der Probe einige Male, bis die Oberfläche möglichst rein und eben ist. Für das Sputtern wird in dieser Arbeit eine Penningquelle PS-IQP 10/63 der Leybold-Heraeus GmbH als Ionenquelle benutzt, bei der durch Gasentladung Ionen gebildet werden. Die Argonionen werden anschließend beschleunigt und treffen mit einer kinetischen Energie von bis zu 5 keV auf die geerdete Probe. Dabei können Sputterströme bis zu 50 µA erzeugt werden. Die Penningquelle ist über ein Nadelventil an eine zuvor mit Argongas mehrmals gespülte Leitung angeschlossen. Vor dem Öffnen des Ventils wird die Kammer mit der Turbopumpe abgepumpt und die Getterpumpe ausgeschaltet, da diese sich sonst in der später in der Kammer vorhandenen Argonatmosphäre selbst sputtern und die in ihr gebundenen Verunreinigungen in die Kammer und auf die Probenoberfläche abgeben würde. Das Nadelventil wird während des Sputterns so weit geöffnet, bis ein Druck von 1.5×10^{-5} mbar in der Präparationskammer erreicht wird, wobei die Kammer beständig durch die Turbopumpe abgepumpt wird.

3.4.3 Molekularstrahlepitaxie (MBE)

Ein weiteres Mittel zur Präparation von Proben ist das Bedampfen von Proben mittels Molekularstrahlen, sodass neues Material auf der Probe wächst. Wenn sich dabei die Kristallstruktur des aufwachsenden Materials teilweise oder ganz an den kristallographischen Richtungen des Substrats orientieren, spricht man von Molekularstrahlepitaxie (engl. *molecular beam epitaxy*, kurz MBE). Hierdurch lassen sich z. B. reproduzierbar dünne Filme hoher Qualität herstellen. Die weitere Darstellung folgt weitestgehend einem Buch von H. Lüth [44].

Auf der Oberfläche entstehen während der MBE Wachstumskeime des aufgedampften Materials. Das weitere Wachstum dieser Keimlinge wird durch die vorhandenen Oberflächenspannungen γ sowie durch die Gasphase über dem Substrat bestimmt. Bild 3.17a zeigt die Verhältnisse der Oberflächenspannungen an einem Keim auf einem Substrat. Die Oberflächenspannung γ_S des Substrats versucht den Keim auf die Substratfläche zu ziehen, während die Grenzflächenspannung γ_{FS} zwischen Substrat und Film sowie die Komponente $\cos \theta \gamma_F$ der Filmoberflächenspannung γ_F den Keim zusammenzuziehen versucht. Dabei ist θ der Steigungswinkel von γ_F gegenüber der Substratoberfläche. Durch die Gasphase über dem Substrat können weitere Teilchen in Abhängigkeit des Drucks p in oder aus dem Film gedrückt werden. Daher kommt zu $\cos \theta \gamma_F$ noch der Anteil $n k_B T \ln(p/p_0)$ hinzu. Dabei ist n die Teilchendichte, k_B die Boltzmannkonstante, T die Temperatur und p_0 der Gleichgewichtsdampfdruck, bei dem keine Energie nötig ist, um Teilchen in den Film hinein- oder herauszubringen. Man nennt das Verhältnis p/p_0 den Übersättigungsgrad. Im Gleichgewicht ergibt sich das sogenannte Bauerkriterium (nach E. Bauer 1958 [56]):

$$\gamma_S = \gamma_{FS} + \cos \theta \gamma_F + n k_B T \cdot \ln\left(\frac{p}{p_0}\right). \quad (3.3)$$

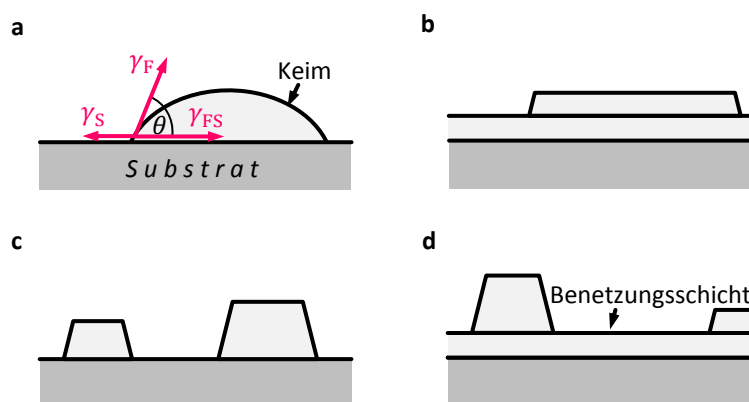


Bild 3.17 | Wachstumsmodi bei der MBE. (a) Bauerkriterium. Dabei ist γ die Grenzflächenspannung (Index F für Film, S für Substrat, FS für Grenzfläche Film/Substrat). Aus dem Verhältnis der verschiedenen γ ergeben sich folgende Wachstumsmodi: (b) Frank-van der Merwe-Typ; (c) Vollmer-Weber-Typ; (d) Stranski-Krastanov-Typ. Darstellung aus [44].

Anhand von Gleichung (3.3) erkennt man, dass das Wachstum nicht nur von den materialspezifischen Parametern γ abhängt, sondern ganz entscheidend auch über den Übersättigungsgrad mitbestimmt wird. Wenn die Oberflächenspannung des Substrats γ_s die anderen Beiträge übersteigt, wird sich der Keim zu einer Lage ausbreiten und es findet ein lagenweises Wachstum statt (Frank-van der Merwe-Typ, siehe auch Bild 3.17b). Der Steigungswinkel ist dabei $\theta = 0$. Ist γ_s allerdings schwächer als die anderen Beiträge, dann findet Inselwachstum statt (Vollmer-Weber-Typ, siehe auch Bild 3.17c). Der Steigungswinkel ist dann $\theta > 0$. Häufig lässt sich auch eine Mischform von lagenweisem Wachstum und Inselwachstum beobachten (Stranski-Krastanov-Typ, siehe auch Bild 3.17d). Dies kann beispielsweise der Fall sein, wenn sich die Gitterkonstanten vom Substrat und dem wachsenden Film voneinander stärker unterscheiden. Dann versucht der wachsende Film zunächst sich dem Substratgitter durch eine elastische Verformung anzupassen (sogenannte Benetzungsschicht). Übersteigt die Verformungsenergie die Adhäsion der Oberfläche, wird die mechanische Spannung durch dreidimensionales Wachstum in Form von Inseln abgebaut.

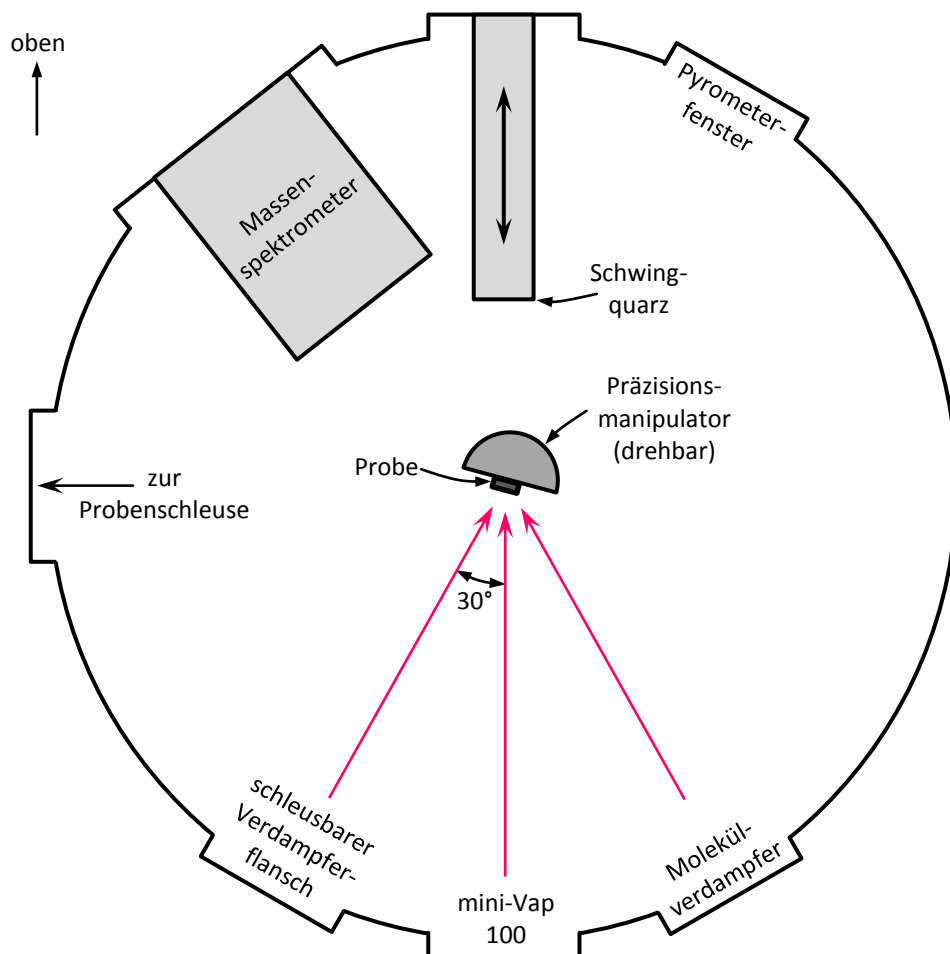


Bild 3.18| Schematischer Querschnitt durch die Präparationskammer. Instrumentation der Präparationskammer für die Herstellung von Molekularstrahlen zur Bedampfung von Proben. Schwingquarz und Massenspektrometer dienen zur Untersuchung der Strahlen. Bild nach [15].

Bild 3.18 zeigt einen schematischen Querschnitt durch die Präparationskammer, der alle für die MBE benötigten Instrumente enthält. Es gibt drei Verdampferstellen, einen Schwingquarz sowie ein Massenspektrometer. Die Herstellung von Molekularstrahlen erfolgt über die entsprechenden Verdampferzellen. Man kann Material z. B. durch einfaches thermisches Erhitzen in einem Tiegel verdampfen. Analog zum Heizen der Tunnelspitzen in Kapitel 3.3.1 kann man den Tiegel bzw. das Material selbst über Elektronenstoß heizen (vgl. auch das nachfolgende Kapitel 3.4.4). Die Qualität der Molekularstrahlen wird durch die Reinheit der zu verdampfenden Materialien und die Qualität der Verdampferkonstruktion bestimmt. Mittels des Massenspektrometers werden die Reinheit der Molekularstrahlen sowie der MBE-Prozess selbst überprüft. Die Reinheit der benutzten Materialien beträgt für Bismut 99.997 %, für Selen 99.999 %, für Tellur 99.9999 % und für Eisen 99.99 %. Mithilfe der Quarzwaage, die sich über eine Linearverstellung in etwa an die Position der Probe fahren lässt, werden die Verdampfer kalibriert, d. h., für die Arbeitsparameter der Verdampfer wird am Ort der Probe eine Aufdampfrate μ bestimmt.

Es gibt einige wichtige Kenngrößen des MBE-Prozesses, die man aus der Aufdampfrate μ berechnen kann. Nach der Aufdampfzeit τ wird auf die Probenflächen A die Schichtdicke $t = \mu\tau$ abgeschieden. Über die Dichte ρ des aufgedampften Materials ergibt sich für die abgeschiedene Masse $m = \rho \cdot At$. Die Stoffmenge ist definiert als $n = N/N_A = m/M$, wobei N_A die Avogadrokonstante, M die Molmasse und N die Teilchenanzahl des aufgedampften Materials ist. Aus der Stoffmenge n und der abgeschiedenen Masse m ergibt sich für die Teilchenflächendichte des aufgedampften Materials während des MBE-Prozesses

$$\frac{N}{A} = \frac{\rho \cdot N_A}{M} \cdot t. \quad (3.4)$$

Im Rahmen dieser Arbeit sollen dünne Filme aus den binären Materialsystemen Bismutselenid (Bi_2Se_3) bzw. Bismuttellurid (Bi_2Te_3) hergestellt werden. Beide Materialien (Bi_2X_3 mit $\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$) bilden sich gemäß den Phasendiagrammen in [57] (vgl. Tabelle 4.2 und Bild 4.6) nur, wenn das atomare Verhältnis $\text{X}:\text{Bi} \geq 3:2$ ist, d. h. die Chalkogene X liegen gegenüber dem Bismut stöchiometrisch betrachtet im Überschuss vor. Aus Gleichung (3.4) ergibt sich für das Teilchenverhältnis $N_{\text{X}}:N_{\text{Bi}}$ während des MBE-Prozesses

$$\frac{N_{\text{X}}}{N_{\text{Bi}}} = \frac{M_{\text{Bi}}}{M_{\text{X}}} \cdot \frac{\rho_{\text{X}}}{\rho_{\text{Bi}}} \cdot \frac{t_{\text{X}}}{t_{\text{Bi}}} = \frac{M_{\text{Bi}}}{M_{\text{X}}} \cdot \frac{\rho_{\text{X}}}{\rho_{\text{Bi}}} \cdot \frac{\mu_{\text{X}}}{\mu_{\text{Bi}}} \geq \frac{1.5}{1}. \quad (3.5)$$

Man kann außerdem die Schichtdicke des entstandenen Bi_2X_3 -Films analog zu Gleichung (3.5) berechnen. Unter der Annahme, dass das gesamte auf die Probe auftreffende Bismut in den entstehenden Bi_2X_3 -Film eingebaut wird [58], folgt für das Verhältnis $\text{Bi}_2\text{X}_3:\text{Bi} = 1:2$. Damit folgt für die Schichtdicke des Bi_2X_3 -Films

$$t_{\text{Bi}_2\text{X}_3} = \frac{1}{2} \frac{M_{\text{Bi}_2\text{X}_3}}{M_{\text{Bi}}} \frac{\rho_{\text{Bi}}}{\rho_{\text{Bi}_2\text{X}_3}} \cdot t_{\text{Bi}} = \frac{1}{2} \frac{M_{\text{Bi}_2\text{X}_3}}{M_{\text{Bi}}} \frac{\rho_{\text{Bi}}}{\rho_{\text{Bi}_2\text{X}_3}} \cdot \mu_{\text{Bi}} \tau. \quad (3.6)$$

3.4.4 Doppelverdampfer (Eigenbau)

Im Rahmen meines Promotionsstudiums wurde in Zusammenarbeit mit C. A. Bobisch, T. Roos, D. Utzat und F. Meyer zu Heringdorf (AG Horn-von Hoegen, Universität Duisburg-Essen) ein Doppelverdampfer entwickelt (siehe Bild 3.19, siehe auch den Anhang in Kapitel 9.1). Der Doppelverdampfer wurde konstruiert, um das simultane Aufdampfen zweier Materialien auf eine Probe zu vereinfachen. Durch zwei eingebaute Kollektoren können die Aufdampfzeiten μ für beide Verdampfer fortlaufend und simultan kontrolliert werden und das Verhältnis beider Materialien lässt sich während des Aufdampfens genau einstellen. Sämtliche UHV-Bauteile wurden von T. Roos konstruiert und zusammengebaut, wobei ein von der AG Horn-von Hoegen entwickelter Elektronenstoßverdampfer [59] ohne Kollektoraufbau Vorbild war. D. Utzat hat eine Steuerelektronik für den Verdampfer entwickelt und gebaut. Der Verdampfer wurde zusammen mit D. Tarasevich und K. Bartsch geprüft und getestet.

Der für diese Arbeit entwickelte Doppelverdampfer beruht auf dem Prinzip der Elektronenstoßheizung (Bild 3.19e). In einem Tiegel befindet sich das zu verdampfende Material. Um den Tiegel ist ein Filament im Abstand von ca. 2 mm angebracht. Zwischen Filament und Tiegel wird eine Hochspannung von ca. 1 kV gegenüber der Anlagenmasse angelegt. Das Filament wird über einen elektrischen Strom geheizt, bis es zur Thermoemission von Elektronen am Filament kommt. Diese Elektronen werden zum Tiegel beschleunigt und heizen den Tiegel auf (max. 30 mA Emissionsstrom). Hierdurch kann man den Tiegel so weit aufheizen, bis das in den Tiegel gefüllte Material verdampft oder sublimiert. Ein Teil der aus dem Tiegel austretenden Atome und Moleküle wird durch Elektronenstoß ionisiert. Ein gegenüber der Anlagemasse auf negativem Potential liegender Ring (ca. -75 eV) saugt die positiven Ionen aus dem Materialstrahl und dient damit als Kollektor für die Ionen. Wie später noch gezeigt wird, ist der hiermit verbundene Kollektorstrom I_K korreliert mit der Anzahl N der austretenden Atome. In dem vorliegenden Doppelverdampfer befinden sich insgesamt zwei Tiegel und daher auch zwei Filamente und zwei Kollektoren.

Bild 3.19a zeigt eine Gesamtaufnahme des Verdampfers. In der Hand befindet sich der Flansch des Verdampfers zum Anschrauben an die Präparationskammer mit einer Nut für eine Kupferdichtung. Nach unten hin befindet sich die Luftseite mit der elektrischen Durchführung für die Filament- und Kollektorströme sowie für die Tiegelhochspannungen (insgesamt sechs Pinne, da beim Filament der Strom über die Anlagenmasse zurückgeführt wird). Außerdem befindet sich dort die Kühlwasserleitung. Diese besteht aus einem Rohr, in das das Kühlwasser hineinfließt. Der Abfluss des Wassers wird durch eine in das Rohr geschobene Kanüle ermöglicht, sodass die Kühlleitung sehr platzsparend ist.

Auf der UHV-Seite (oben) befindet sich der Verdampferkopf (siehe auch Bild 3.19b), der über die Kühlwasserleitung mit dem Flansch und hierdurch mit der Anlagenmasse verbunden ist. Der Verdampferkopf besteht aus einem Kupferkörper, der durch die hohe Wärmeleitfähigkeit von Kupfer schnell die überschüssige Wärme vom Elektronenstoßheizen an das Kühlwasser abgeben kann.

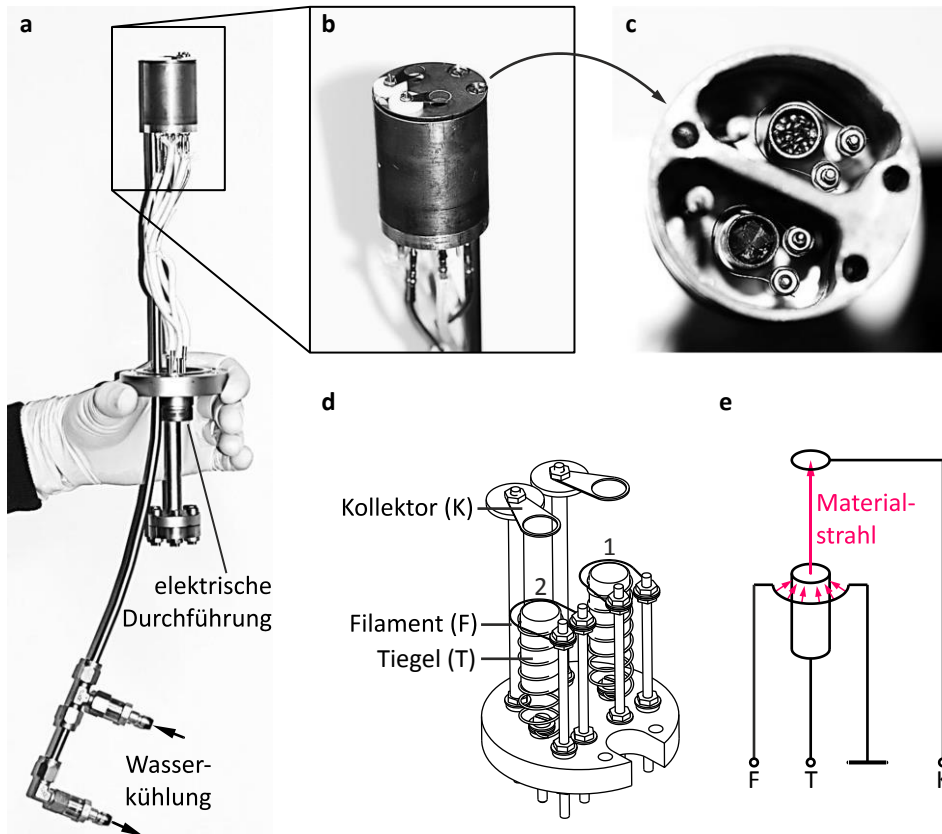


Bild 3.19 | Aufbau des Doppelverdampfers. (a) Gesamtansicht des Doppelverdampfers. (b) Nahaufnahme des Verdampferkopfes. (c) Blick in die beiden Verdampferkammern mit Tiegel und Filament. (d) Zeichnung der Trägerplatte mit Filament, Tiegel und Kollektor. (e) Prinzip eines Elektronenstoßverdampfers. Photographien in a-c von S. Bauer und K. Bartsch, technische Zeichnung in d von T. Roos.

Der Kühlkörper gliedert sich in zwei Verdampferkammern (Bild 3.19c). In jeder Kammer befinden sich jeweils ein Filament mit einem Tiegel sowie die durch Keramikröhren isolierte Zuleitung zum Kollektor. Alle Aufbauten sind gegenüber der Trägerplatte elektrisch isoliert bis auf eine Seite des Filaments, sodass der Filamentstrom über die Anlagenmasse zurückgeführt werden kann. Über Kabel sind die isolierten Aufbauten der Trägerplatte mit der elektrischen Durchführung verbunden. Die Trägerplatte kann mit drei Schrauben an der Unterseite des Verdampferkopfes befestigt werden, wobei auf der Oberseite des Kühlkörpers noch eine Blende zwischengeklemmt ist (Bild 3.19b). Bild 3.19d zeigt die Trägerplatte mit aufgeschraubten Kollektorringen.

Die von D. Utzat nach Vorlage von [60] konstruierte Steuerelektronik ermöglicht die bequeme Einstellung des Filamentstroms, der Tiegelspannung und der Kollektorspannung sowie das Auslesen des Emissionsstroms und des Kollektorstroms. Außerdem kann das Gerät über den Filamentstrom auf einen vorgegebenen Emissions- oder Kollektorstrom regeln, sodass die Präparation von binären Systemen auch durch diese Regelung vereinfacht wird.

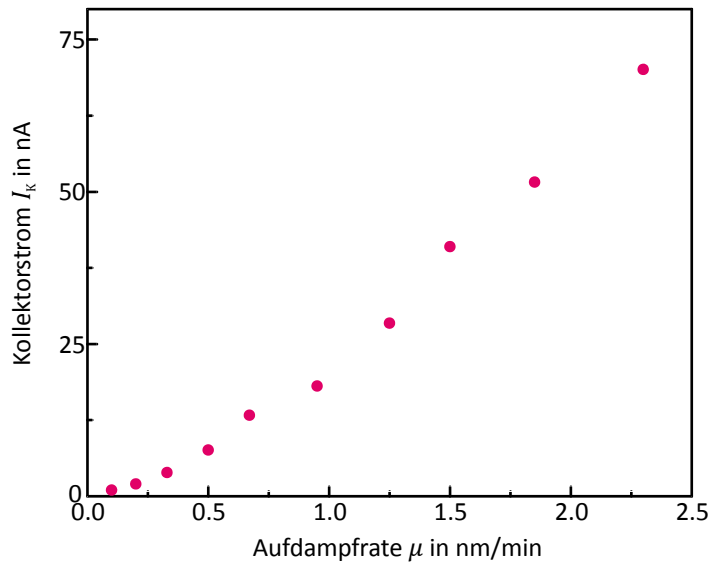


Bild 3.20 | Beziehung zwischen Kollektorstrom I_K und Aufdampfrate μ .

Bei der Messung wurde Bismut als Verdampfungs-material benutzt. Darstellung ähnlich zu [61].

Während des bisherigen Betriebs gab es innerhalb der Verdampferkammern immer wieder Kurzschlüsse der Kollektorzuleitung. Es wird daher angestrebt, künftig die Kollektorzuleitung aus der Verdampferkammer zu entfernen und über eine separate Bohrung im Kühlkörper zu führen.

Wichtigstes Kennzeichen des Doppelverdampfers gegenüber der bisherigen Verdampferkonstruktion ist neben der Integration einer zweiten Verdampferkammer vor allem die Messung des Ionenstroms I_K zur Überwachung des Teilchenflusses während des Aufdampfens. In Bild 3.20 ist I_K gegen die Aufdampf-rate μ aufgetragen für den Fall der Verdampfung von Bismut. Für die Messung wurde die Beschleunigungsspannung auf den Tiegel auf 1 kV konstant gehalten und der Emissionsstrom über das Filament schrittweise von etwa 2.5 mA bis auf 5.3 mA erhöht. Gleichzeitig wurde dabei der Kollektorstrom I_K (ca. 1 bis 71 nA) notiert und mittels der Quarzwaage in der Präparationskammer die Aufdampf-rate (ca. 0.1 bis 2.3 nm/min) bestimmt (vgl. Kapitel 9.1.1). Mit zunehmender Verdampferrate μ steigt auch der gemessene Kollektorstrom I_K monoton. Daher eignet sich die Messung des Kollektorstroms I_K zur Flusskontrolle und damit zur Abschätzung der Aufdampf-rate μ .

4 Probensystem

4.1 Benutzte Materialien

Im Rahmen dieser Arbeit wurde bei den meisten Proben ein Siliciumwafer als Substrat benutzt, auf dem über MBE zeitgleich Bismut und Selen bzw. Tellur zur Herstellung dünner Bismutselenid- bzw. Bismuttellurid-Schichten aufgedampft wurden. Daher werden diese Materialien mit ihren Eigenschaften hier kurz vorgestellt (Darstellung folgt weitestgehend [62]). Eine Übersicht über die Eigenschaften der benutzten Materialien gibt die folgende Tabelle:

Tabelle 4.1 | Physische Eigenschaften der benutzten Materialien. Daten aus [63] entnommen.

Material	Silicium	Bismut	Selen (grau)	Tellur
Elementgruppe (IUPAC)	14	15	16	16
Ordnungszahl	14	83	34	52
rel. Atommasse in u	28.08	208.98	78.96	127.6
wichtigste Isotope (natürl. Häufigkeit)	²⁸ Si (92.2 %)	²⁰⁹ Bi (100 %)	⁷⁶ Se (9.4 %) ⁷⁷ Se (7.6 %) ⁷⁸ Se (23.8 %) ⁸⁰ Se (49.6 %) ⁸² Se (8.7 %)	¹²⁵ Te (7.1 %) ¹²⁶ Te (18.8 %) ¹²⁸ Te (31.7 %) ¹³⁰ Te (34.1 %)
Dichte in g/cm ³	2.33	9.75	4.81	6.24
Schmelzpunkt in °C	1414	271	221	450
Siedepunkt in °C	3265	1564	685	988

4.1.1 Silicium (Si)

Silicium (von lat. *silex, silicis* »Kiesel«, Symbol Si) ist ein Element in der 14. Gruppe (IUPAC-Standard) im Periodensystem der Elemente mit der Ordnungszahl 14. Einige wichtige physikalische Eigenschaften von Si sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Als kristalliner Festkörper ist Si hart und spröde, wobei es eine graue Farbe mit einem metallischen Glanz zeigt. Si ist ein indirekter Halbleiter (Bandlücke etwa 1.1 eV) und kann durch Elemente der Gruppe 13 (z. B. Bor) oder 15 (z. B. Phosphor) dotiert werden. Mit fast 26 % ist Si das zweithäufigste Element in der Erdkruste (nur Sauerstoff (O) ist häufiger), wobei es fast nur in gebundener Form als SiO₂ (z. B. Quarz) oder als Silicat vorkommt. Chemisch ist es verhältnismäßig inert. Biologisch bedeutsam ist Si in Kieselsäure zur Festigung organischen Gewebes. In der Halbleiterindustrie hat Si eine große technische Bedeutung als Grundbaustein für die Herstellung integrierter Schaltkreise.

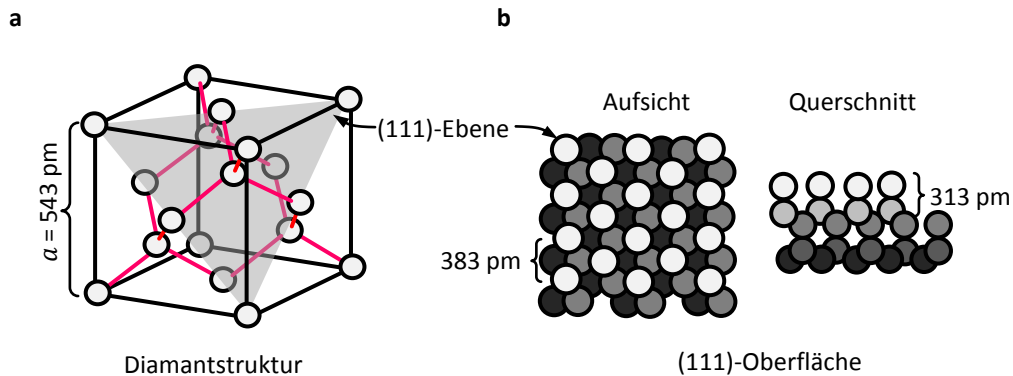


Bild 4.1 | Kristallstruktur des Siliciums. (a) Einheitszelle des Si-Kristallgitters (Diamantstruktur). (b) Aufsicht und Querschnitt der Si(111)-Fläche. Die Farbe der Si-Atome geben ihre Tiefe gegenüber der (111)-Oberfläche wieder: Je dunkler, desto tiefer liegen die Atome. Bild aus [15].

Si kristallisiert in der Diamantstruktur (siehe Bild 4.1a, halbtransparente Fläche ist die (111)-Ebene), wobei die Gitterkonstante $a = 543 \text{ pm}$ beträgt. Das Si-Atom ist sp^3 -hybridisiert und hat daher im Kristall zu vier Nachbaratomen eine kovalente Bindung. Die in dieser Arbeit benutzten Si-Oberflächen weisen eine (111)-Orientierung auf (siehe Bild 4.1b), wobei die Gitterkonstante $a/\sqrt{2} = 383 \text{ pm}$ auf der Si(111)-Oberfläche beträgt. Eine Einzelstufe auf der Si(111)-Oberfläche wird aus einer Si-Doppellage mit der Höhe $a/\sqrt{3} = 313 \text{ pm}$ gebildet [51].

4.1.2 Bismut (Bi)

Bismut (Transliteration von griech. *psimýthion* »Bleiweiß«, Symbol Bi) ist ein Schwermetall aus der 15. Elementgruppe mit der Ordnungszahl 83. Einige wichtige physikalische Eigenschaften von Bi sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Bi bildet weißrötliche, glänzende und spröde Kristalle mäßiger Härte. Bi hat den stärksten Diamagnetismus aller Metalle und eine im Vergleich zu den übrigen Metallen sehr kleine elektrische Leitfähigkeit. In der Natur kommt es gediegen und als Verbindung vor (z. B. als Bismutglanz). Chemisch ist Bismut verhältnismäßig reaktionsträge und bildet bei feuchter Luft nur eine dünne Oxidschicht. Biologisch besitzt es nur eine geringe Bedeutung. Technisch bedeutsam ist Bi für Spezialanwendungen wie beispielsweise niedrigschmelzende Legierungen, Pigmente sowie in der Pharmazie. Bi kristallisiert in einer rhomboedrischen Gitterstruktur [64], die man auch in einer hexagonalen Form darstellen kann (siehe Bild 4.2a). Die Basis ist zweiatomig, wobei die Basisatome einen Abstand von $d = 553 \text{ pm}$ in der rhomboedrischen [111]-Richtung haben. Das hexagonale Gitter hat die Gitterkonstanten $a = 453 \text{ pm}$ und $c = 1180 \text{ pm}$. Da die Bi(111)-Oberfläche eine niedrige Oberflächenenergie besitzt, wächst Bi bevorzugt in die [111]-Richtung in Form von Bilagen (Dicke $t = 394 \text{ pm}$), deren Oberflächengitter als hexagonal betrachtet werden kann.

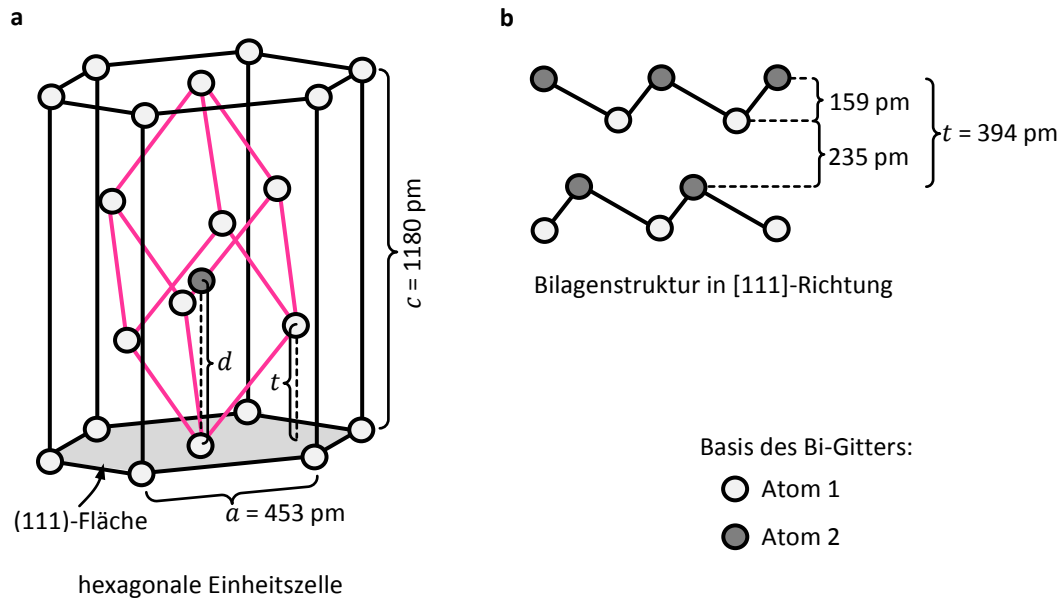


Bild 4.2| Kristallstruktur des Bismuts. (a) Bi-Struktur, dargestellt in einem hexagonalen Gitter. In das Gitter ist die rhomboedrische Einheitszelle der Bi-Struktur eingezeichnet. Die Basis für beide Gitter wird von zwei Atomen gebildet. (b) Bilagenstruktur des Bi-Gitters in $[111]$ -Richtung der rhomboedrischen Einheitszelle. Darstellung nach [64].

4.1.3 Selen (Se) und Tellur (Te)

Selen (griech. *selēnē* »Mond«, Symbol Se) und Tellur (lat. *tellus* »Erde«, Symbol Te) sind – wie ihre dualistischen Namen schon andeuten – hinsichtlich ihrer chemischen Eigenschaften sehr eng miteinander verwandt. Beide Elemente gehören zur Elementgruppe 16, deren Mitglieder häufig in Form von Erzen und Mineralien vorliegen und daher als Chalkogene (von griech. *chalkós gennáo* »Erzbildner«) bezeichnet werden. Se liegt in der 4. Periode und hat die Ordnungszahl 34; Te folgt ihm in der 5. Periode mit der Ordnungszahl 52. Einige wichtige physikalische Eigenschaften von Se und Te sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. In der Natur kommen Se und Te äußerst selten in gediegener Form und in geringer Menge als Beimischung zu anderen Erzen vor. Technisch finden Se und Te Verwendung in der Halbleiterindustrie sowie als Legierungsbeimischung. Se als Reinstoff hat verschiedene Modifikationen, von denen hier mit dem sogenannten grauen Selen gearbeitet wurde. Das graue Se ist die thermodynamisch stabilste Form und hat sowohl metallische wie halbleitende Eigenschaften. Te ist ein Halbmetall, das in Reinform als silberweißes metallisches Tellur oder als dunkelbraunes amorphes Tellur vorkommt, wobei hier mit dem metallischen Te gearbeitet wurde. Gegenüber Se zeigt Te einen stärkeren metallischen Charakter. Se und Te sind beide giftig, jedoch ist Se ein essentielles Spurenelement für den Menschen.

4.2 Aufbau der Schichtproben

In dieser Arbeit werden vornehmlich dünne Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_2 -Schichten untersucht. Daher werden im Folgenden die jeweiligen Präparationsschritte für die Herstellung dieser Schichten einschließlich ihrer räumlichen Struktur erläutert.

4.2.1 Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion

Als Substrat für die Schichtproben wird die Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion benutzt (siehe Bild 4.3 und auch Bild 3.11). Gegenüber der unrekonstruierten Si(111)-(1×1)-Oberfläche hat die (7×7)-Rekonstruktion eine geringere Oberflächenenergie, da sie weniger offene Bindungen auf der Oberfläche aufweist als die (1×1)-Oberfläche, bei der jedes Oberflächenatom eine ungesättigte Bindung hat. Erst bei Temperaturen von über 830 °C [65] findet ein Phasenwechsel von der (7×7)-Rekonstruktion zur unrekonstruierten (1×1)-Oberfläche statt, die dann eine stabilere Phase darstellt. Die (7×7)-Rekonstruktion wurde erstmalig im Realraum mithilfe des STM 1983 atomar aufgelöst [66].

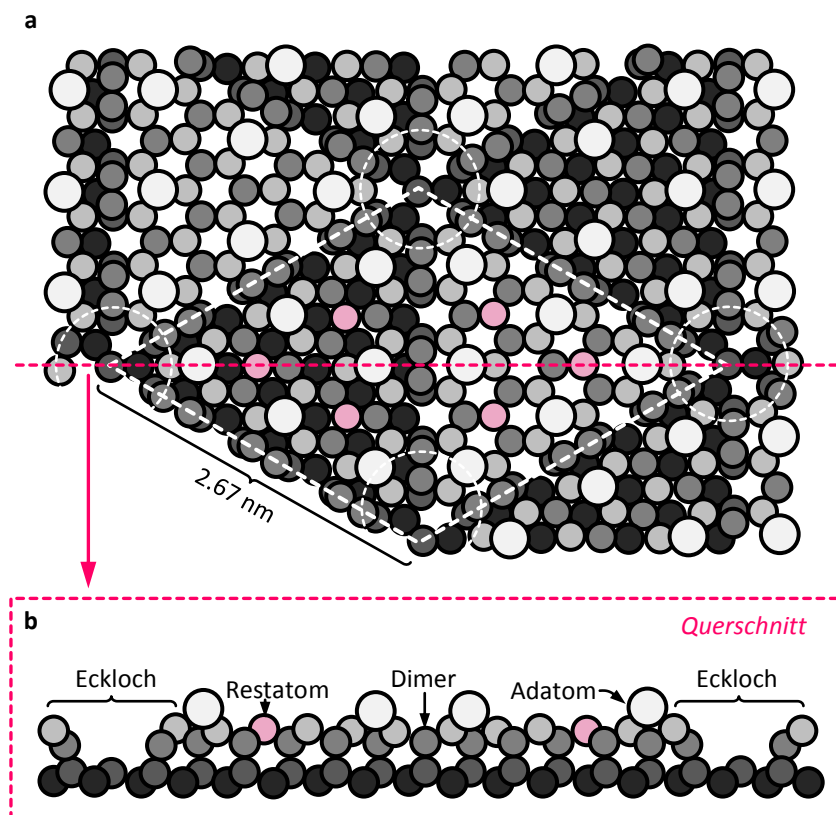


Bild 4.3| Struktur der (7×7)-Rekonstruktion auf der Si(111)-Oberfläche. (a) Oberfläche der Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion mit eingezeichneter (7×7)-Einheitszelle. (b) Querschnitt entlang der Symmetrieachse der Einheitszelle. Je näher die Atome an der (111)-Oberfläche liegen, desto heller ist ihr Farbton. Darstellung nach [67].

Passend zu den STM-Daten wurde 1985 das Dimer-Adatom-Stapelfehler(DAS)-Modell [67] für die (7×7)-Rekonstruktion entwickelt, das die Rekonstruktionsstruktur vollständig beschreibt (siehe auch Bild 4.3). Die Einheitszelle der (7×7)-Rekonstruktion besteht in der obersten Lage aus zwölf Adatomen (große weiße Kugeln in Bild 4.3), wobei die Gitterkonstante der (7×7)-Einheitszelle $7 \times 383 \text{ pm} = 2.68 \text{ nm}$ groß ist. Jedes Adatom hat eine von der (111)-Oberfläche wegzeigende ungesättigte Bindung. Die beiden Atomlagen unter der Adatomlage haben in einer Hälfte der Einheitszelle einen Stapelfehler gegenüber der Volumenstruktur von Si (rechte, helle Seite in der eingezeichneten Einheitszelle in Bild 4.3). Zwischen den Adatomen befinden sich in der zweiten Atomlage noch sechs sogenannte Restatome, die jeweils eine ungesättigte Bindung wie die Adatome aufweisen. Am Rand der Einheitszelle sowie auf der Grenze zwischen dem stapelfehlerfreien und stapelfehlerbehafteten Teil der Einheitszelle befinden sich in der dritten Atomlage insgesamt neun Atomdimere je Einheitszelle, deren Bindungen chemisch abgesättigt sind. In den Ecken der Einheitszelle bildet die Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion Löcher aus (engl. *corner holes*, weiße Kreise in Bild 4.3). In der Mitte eines jeden Eckloches befindet sich ein Atom der dritten Atomlage mit einer ungesättigten Bindung. Insgesamt besitzt die Einheitszelle 19 ungesättigte Bindungen, was gegenüber den 49 ungesättigten Bindungen auf der gleichen Fläche bei der unrekonstruierten (1×1)-Fläche energetisch gesehen eine deutliche Verbesserung darstellt.

Für alle Schichtproben in dieser Arbeit wurden als Substrat leicht oxidierte Si-Wafer der Robert Bosch GmbH verwendet. Die mit Phosphor schwach n-dotierten Si-Wafer haben eine elektrische Leitfähigkeit von 7.7 mS/cm und einer Fehlneigung von etwa 0.5°, was etwa 30 Si-Einzelstufen/μm entspricht. Für die Präparation der Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion werden die Si-Wafer mittels eines Diamantschneiders in passende Probenstücke geschnitten und in den Probenträger eingespannt (siehe auch Bild 3.16). Anschließend wird der Träger mit dem Si-Wafer in die Präparationskammer eingeschleust und über das Filament im Präzisionsmanipulator so lange erhitzt, bis die mit dem Pyrometer (Emissionsgrad 1 eingestellt) gemessene Temperatur bei etwa 400 °C liegt. Ab dieser Temperatur ist der Wafer so leitfähig, dass man ihn über einen elektrischen Strom, den man direkt durch den Wafer selbst führt, weiter aufheizen kann. Man erhöht die Temperatur des Wafers durch den Direktstrom auf 600 °C und belässt ihn auf dieser Temperatur für etwa 16 h, um letzte Verunreinigungen zu lösen. Danach heizt man den Wafer zyklisch von 600 °C schrittweise kurz auf 700 °C, 800 °C, 900 °C, 1000 °C, 1050 °C, 1100 °C und 1150 °C, wobei der Druck in der Präparationskammer nicht höher als 5×10^{-9} mbar sein sollte. Durch diese Prozedur wird die Oxidschicht von der Waferoberfläche abgedampft. Danach wird die Probe dreimal von 600 °C auf 1150 °C geheizt und nach dem letzten Heizvorgang erst auf 900 °C gebracht, um von dort aus mit 2-3 °C/s auf 700 °C gekühlt zu werden. Durch das langsame Abkühlen von 900 °C auf 700 °C wird sichergestellt, dass sich der Phasenübergang bei 830 °C von der (1×1)-Rekonstruktion zur (7×7)-Rekonstruktion vollständig ausbildet.

4.2.2 Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion

Die Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion wird durch Bedampfen mit Bismut zur Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion [68] umgeformt (siehe Bild 4.4), damit diese als Substrat für die Bi_2Se_3 -Schichten genutzt werden kann [69]. Die rhomboedrische Einheitszelle der Bi-Rekonstruktion hat eine Gitterkonstante von $\sqrt{3} \times 383 \text{ pm} = 663 \text{ pm}$. Dabei liegen die Gitterplätze der Bi-Rekonstruktion auf sogenannten T_4 -Gitterplätzen in der zweiten Atomlage des Si(111)-Substrats (siehe Bild 4.4). Für die $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion gibt es zwei Phasen, die sich in der Basis des Gitters unterscheiden. Die sogenannte α -Phase hat als Gitterbasis je ein Bi-Adatom, die sogenannte β -Phase hat als Basis ein Trimer aus Bi-Atomen. Gemäß [68] entsteht die $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion, indem man wenigen Monolagen (ML, bezogen auf die Flächendichte von $7.87 \times 10^{14} \text{ Atome/cm}^2$ der Si(111)-Oberfläche) Bi bei Raumtemperatur aufdampft. Anschließend heizt man die Probe, bis das überschüssige Bi von der Oberfläche desorbiert. Ab einer Temperatur von etwa 220 °C kann man mittels LEED Beugungsreflexe der $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion sehen, die gemäß Wan et al. [68] am schärfsten bei etwa 300 °C werden. Es handelt sich dabei um die β -Phase der $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion mit Trimeren als Basis (Bedeckung der Oberfläche 1 ML Bi). Zwischen 300 °C bis 360 °C beobachteten Wan et al. einen Übergangsbereich mit unscharfen LEED-Reflexen, bei dem sich die Basis des Gitters von Bi-Trimere (β -Phase) unter Desorption von Bi zu einzelnen Bi-Adatomen (α -Phase) umwandelt. Bei 360 °C ist diese Umwandlung abgeschlossen und es erscheinen durch die ausgebildete α -Phase $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion wieder scharfe Beugungsreflexe.

In dieser Arbeit wurde analog zu [68] für die Herstellung der Bi_2Se_3 -Schichten die α -Phase $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion präpariert, indem auf die Si(111)-Oberfläche ein dünner Bi-Film weniger Nanometer Dicke aufgedampft und anschließend die Probe auf etwa 450 °C geheizt wurde.

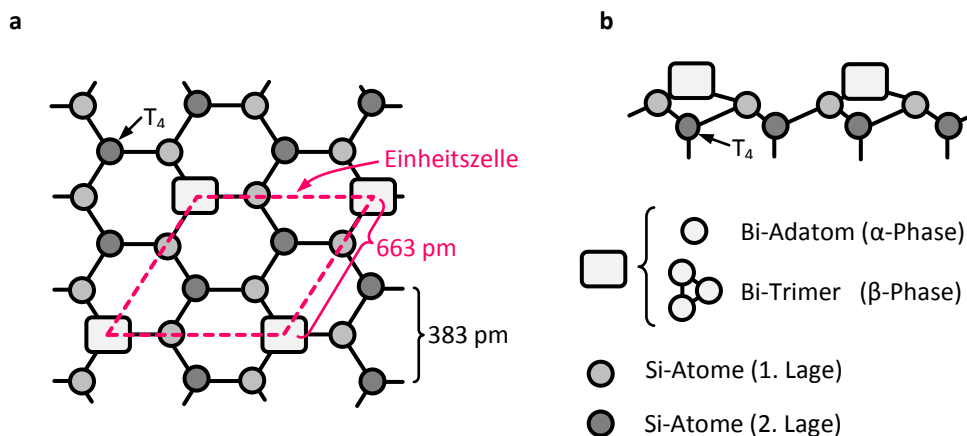


Bild 4.4| Struktur der α - und β -Phase der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-Bi-Rekonstruktion. (a) Aufsicht auf die Si(111)-Oberfläche mit der Einheitszelle der ($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-R30°-Bi-Überstruktur. (b) Seitensicht der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-R30°-Bi-Überstruktur. Je dunkler, desto tiefer liegen die Atome. Bild nach [68].

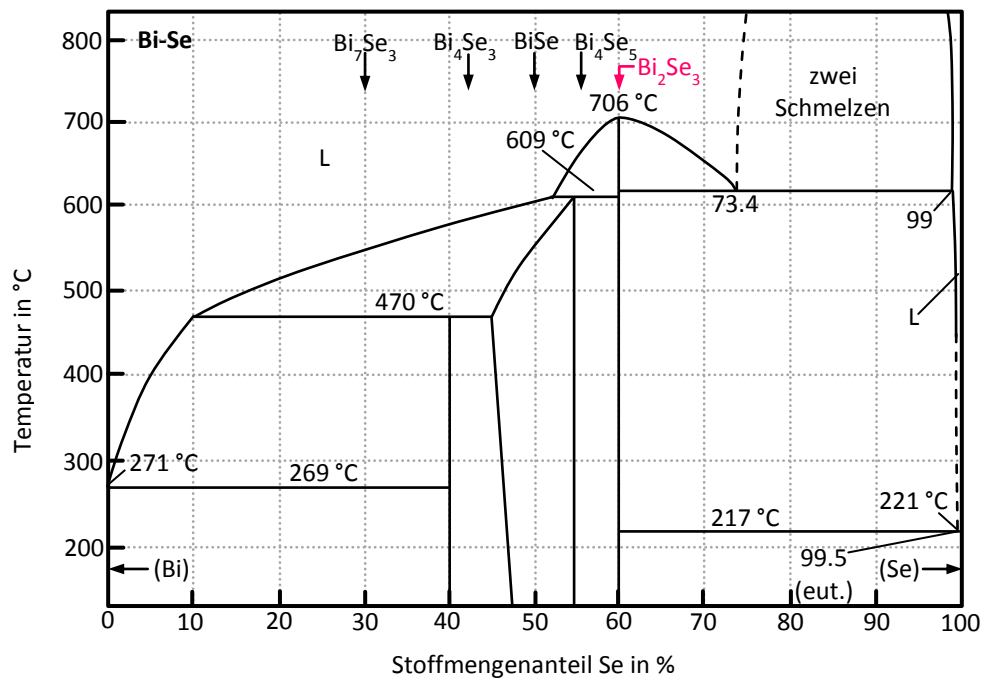
Tabelle 4.2| Physikalische und strukturelle Eigenschaften von Bismutselenid und -tellurid. Physikalische Eigenschaften und Gitterkonstanten von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 sowie die Gitterkonstanten artverwandter Systeme. Daten entnommen aus [63] (rel. Atommasse, Dichte und Schmelzpunkt) und [57] (Gitterkonstanten a und c , siehe auch Bild 4.5).

Material	rel. Atommasse in u	Dichte in g/cm^3	Schmelzpunkt in $^\circ\text{C}$	a in nm	c in nm
Bi_2Se_3	654.84	7.51	710	0.414	2.855
Bi_4Se_5				0.421	5.154
BiSe				0.418	2.284
Bi_4Se_3				0.427	3.997
Bi_7Se_3				0.443	11.640
Bi_2Te_3	800.76	7.74	580	0.438	3.057
$\text{Bi}_{45}\text{Te}_{55}$				0.442	0.781
BiTe				0.440	2.397
Bi_4Te_3				0.443	4.187
Bi_7Te_3				0.447	11.900

Grundlegende physikalische Eigenschaften und die hexagonalen Gitterkonstanten von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 sind in Tabelle 4.2 zusammenfasst, wobei auch die Gitterkonstanten artverwandter Systeme aufgeführt sind. Innerhalb der Bi_2X_3 -Struktur unterscheiden sich die Chalkogene X (Te oder Se) nach ihrem Bindungscharakter zur Umgebung: Zum Teil gehen sie van der Waals- und ionisch-kovalente Bindungen ein (Bindungstyp 1, kurz X1). Sonst sind sie rein kovalent gebunden (Bindungstyp 2, kurz X2). Van der Waals-Bindungen sind sehr schwache Bindungen, sodass sich die Bi_2X_3 -Struktur leicht entlang einer X1-Schicht bzw. entlang der (111)-Ebene im rhomboedrischen Gitter verschieben lässt. Man kann daher die Struktur in Stapelfolgen der Form X1-Bi-X2-Bi-X1 weiter aufteilen, die in sich vor allem kovalent gebunden sind. Gemäß dem lateinischen Wort *quintuplus* für »fünffach« nennt man diese Folgen Quintupellagen (kurz QL, Dicke = $\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c des hexagonalen Gitters von Bi_2X_3). Die Bi_2X_3 -Systeme können daher QL für QL auf der Si(111)-Oberfläche wachsen (Frank-van der Merwe-Typ, vgl. Kapitel 3.4.3).

Zur Herstellung der Bi_2Se_3 -Schichten wurde ein Präparationsrezept von Zhang et al. [69] benutzt: Auf die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion wurde bei Raumtemperatur (RT) zeitgleich Se und Bi im stöchiometrischen Verhältnis 1.5:1 aufgedampft und anschließend die Probe für etwa 5 min auf 120 $^\circ\text{C}$ geheizt. Da Selen einen hohen Dampfdruck hat, neigt es bei der Präparation dazu, im entstehenden Film Leerstellen zu bilden [71]. Diese wirken wie ein Donor und ergeben eine n-Dotierung im Halbleiter Bi_2Se_3 . Unterschreitet das Atomverhältnis Se:Bi auf der Oberfläche das stöchiometrische Verhältnis zu weit (siehe Phasendiagramm Bi-Se in Bild 4.6a), können sich statt Bi_2Se_3 artverwandte Systeme wie z. B. Bi_4Se_5 bilden, die sich im LEED und STM wegen der ähnlichen Gitterkonstante a nur schwer unterscheiden lassen (siehe Tabelle 4.2). Daher wurde ein gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis höhere Atomverhältnis von mindestens Se:Bi = 2:1 benutzt [69]. Teilweise wurden die aufgedampften Filme zum Ausheilen analog zu [72] bei höheren Temperaturen um 250 $^\circ\text{C}$ getempert.

a



b

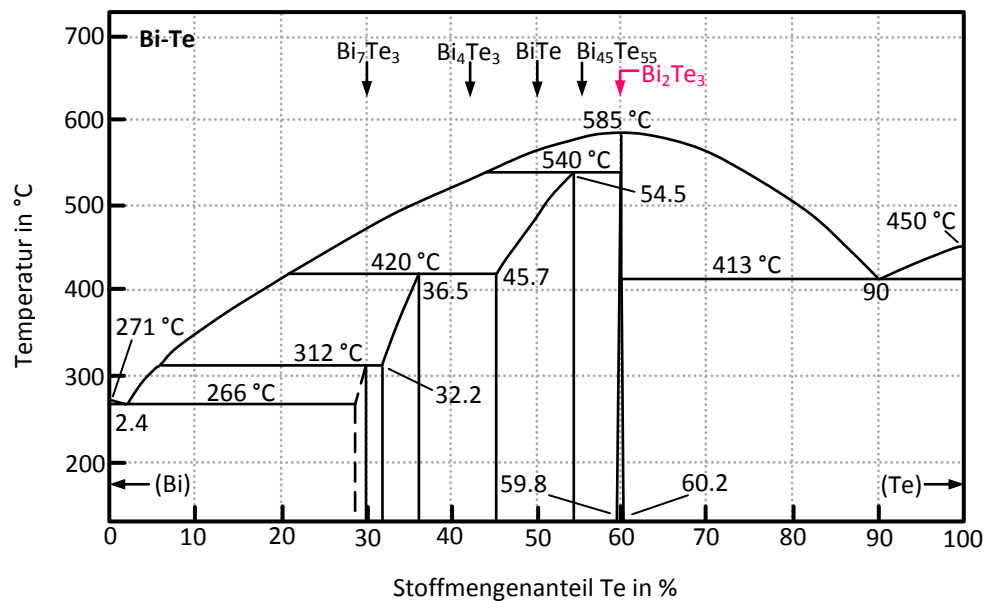


Bild 4.6| Isobare Phasendiagramme der Systeme Bi-Se und Bi-Te. In beiden Systemen gibt es nahe der gewünschten Materialsysteme Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ andere binäre Systeme (siehe auch Tabelle 4.2), die ähnliche strukturelle Eigenschaften haben. Diagramme aus [57].

Für die Bi₂Te₃-Schichten wurde ein Präparationsrezept von Krumrain et al. [73] angewendet: Te und Bi werden in einem Atomverhältnis von 10:1 auf die 250 °C heiße Si(111)-(7×7)-Probe aufgedampft. Durch den Te-Überschuss soll die Ausbildung anderer Bi-Te-Verbindungen (siehe Tabelle 4.2 und Bild 4.6b) verhindert und eine n-Dotierung im Bi₂Te₃ [74] gemindert werden. Die empfohlene Probertemperatur begünstigt ein geordnetes Wachstum des Films [73].

4.3 Topologische Isolatoren (TI)

Topologische Isolatoren (TI) sind eine neue Materialklasse, die sich durch die nicht-triviale Topologie ihrer Bandstruktur auszeichnen. Die TI wurden 2005 durch ein theoretisches Konzept von C. L. Kane und E. J. Mele [1] postuliert.

4.3.1 Topologie

Der Begriff Topologie (von griech. *tópos* »Ort« und *lógos* »Lehre«) – nicht zu verwechseln mit dem Begriff Topographie – bezeichnet eine Disziplin in der Mathematik, die sich mit den Eigenschaften einer mathematischen Struktur unter einer Verformung beschäftigt. Die Verformung, auch Homöomorphismus genannt, erfolgt dabei stetig und eindeutig. Als homöomorph oder topologisch invariant werden die topologischen Eigenschaften bezeichnet, die beim Homöomorphismus erhalten bleiben und die mathematische Struktur hinsichtlich ihrer Topologie auszeichnen.

Diese zuvor besprochenen Zusammenhänge sollen anhand dreier einfacher geometrischer Körper erläutert werden (siehe Bild 4.7): Würfel, Kugel und Volltorus. Von ihrer Geometrie – sprich Symmetrieachsen, Spiegelebenen usw. – sind der Würfel und die Kugel verschieden. Jedoch lassen sie sich durch eine stetige Verformung eindeutig ineinander überführen. Daher sind sie aus topologischer Sicht gleich! Möchte man stattdessen die Kugel zu einem Volltorus formen, so müsste man hierfür ein Loch in die Kugel schneiden. Daher ist diese Verformung nicht stetig und eindeutig und der Volltorus topologisch anders als die Kugel. Man kennzeichnet die Topologie dieser geometrischen Körper durch die Zahl ν der Löcher – auch Geschlecht genannt – ihrer Oberfläche: So haben Würfel und Kugel das Geschlecht $\nu = 0$ (auch topologisch trivial genannt) und der Volltorus das Geschlecht $\nu = 1$. Daher ist das Geschlecht die topologische Eigenschaft bzw. Invariante ν der jeweiligen Körperoberfläche.

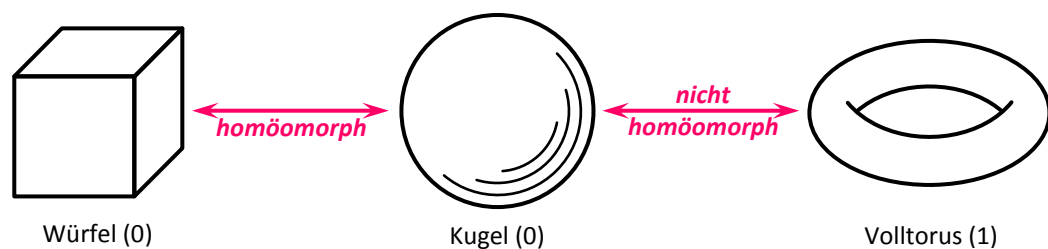


Bild 4.7| Topologie dreier einfacher geometrischer Körper. In Klammern ist das Geschlecht ν (Zahl der Löcher in der Oberfläche) der Körperoberflächen angegeben. Würfel und Kugel sind zwar von Geometrie und Symmetrie unterschiedlich, jedoch topologisch gleich (homöomorph). Der Volltorus hat gegenüber den beiden anderen Körpern ein anderes Geschlecht und ist daher topologisch andersartig. Zeichnung aus [15].

4.3.2 Bandstruktur von TI

Analog zu dem zuvor genannten Beispiel der geometrischen Körper kann man auch die Bandstruktur eines Kristalls hinsichtlich ihrer Eigenschaften bei einer mathematischen Verformung untersuchen und ihr entsprechende topologische Eigenschaften zuordnen. Nachfolgend wird die Bandstruktur topologischer Isolatoren vorgestellt, wobei die Darstellung drei Übersichtsartikeln über TI folgt (M. Z. Hasan und C. L. Kane [5], Y. Ando [2] sowie L. Fu und C. L. Kane [75]).

Topologische Isolatoren sind – wie der Name Isolator andeutet – Materialien mit einer Bandlücke in ihrer Bandstruktur, die topologisch nicht-trivial ist. Dabei wird der Begriff Isolator weit gefasst und umfasst alle Materialien mit einer Bandlücke, unabhängig von der Größenordnung ihrer Leitfähigkeit bei Raumtemperatur, also auch Materialien, die üblicherweise als Halbmetall oder als Halbleiter bezeichnet werden.

Allgemein wird in einem Kristall die Bandstruktur durch Energiebänder $E_n(\mathbf{k})$ gebildet, wobei \mathbf{k} der Wellenvektor der Elektronen im reziproken Raum und n der Index des Bandes ist. Üblicherweise reduziert man die Betrachtung der Bandstruktur im reziproken Raum auf die Brillouinzone (BZ, siehe hierzu auch Kapitel 2.5.2). Die Energiebänder $E_n(\mathbf{k})$ sind die Eigenwerte der zur BZ des Kristalls zugehörigen Blochzustände $|u_n(\mathbf{k})\rangle$, die entsprechend gitterperiodisch im reziproken Raum bzw. randperiodisch in der BZ sind:

$$\hat{H}(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle = E_n(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle. \quad (4.1)$$

Dabei ist $\hat{H}(\mathbf{k})$ der zur BZ zugehörige Blochhamiltonian. Bei einem gewöhnlichen Isolator bzw. Halbleiter/Halbmetall wird die Bandstruktur durch eine Bandlücke in ein Leitungsband und ein Valenzband getrennt (vgl. Bild 4.8a).

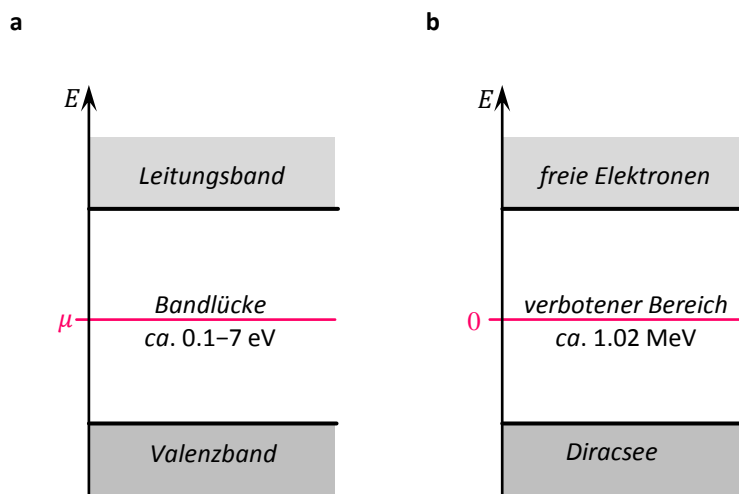


Bild 4.8| Bandschemata verschiedener Isolatoren. (a) Bandschema eines Isolators bzw. Halbleiters/Halbmetalls. (b) Diracstruktur des Vakuums. Das Vakuum ähnelt in seiner elektronischen Struktur einem Isolator. Bild aus [15].

Dabei ist das Valenzband bei 0 K vollständig besetzt und das Leitungsband leer. Das chemische Potential liegt innerhalb der Bandlücke. Bei höheren Temperaturen gelangen Elektronen durch die thermische Verschmierung der Fermiverteilung auch in das Leitungsband. Die Position des chemischen Potentials als Gleichgewichtsgröße verlagert sich gewichtet nach den vorhandenen Zustandsdichten im Valenz- und Leitungsband bei höheren Temperaturen. Man unterscheidet Materialien hinsichtlich der Größe ihrer Bandlücke. Bei Materialien mit einer Bandlücke von ca. 3-7 eV spricht man von Isolatoren, da hier kaum Elektronen bei Raumtemperatur intrinsisch durch die thermische Verschmierung der Fermiverteilung in das Leitungsband gelangen können. Ist die Bandlücke kleiner (ca. 0.1-3 eV), so gelangt ein deutlich größerer Anteil an Elektronen in das Leitungsband und man spricht von Halbleitern. Bei Bandlücken kleiner 0.1 eV spricht man von Halbmetallen und bei einer Überlappung von Leitungs- und Valenzband von Metallen. Durch eine leichte Veränderung des Blochhamiltonians kann man dabei die Bandlücke in ihrer Größe verändern, ohne sie zuvor schließen zu müssen. In diesem Sinne sind gewöhnliche Isolatoren, Halbleiter und Halbmetalle einander ähnlich und topologisch gleich, sodass man von dieser Gruppe als *triviale Isolatoren* spricht. Zu den trivialen Isolatoren zählt auch das Vakuum (siehe auch Bild 4.8b): Gemäß P. Dirac besteht das Vakuum aus einem Diracsee genannten Valenzband, in dem Elektronen mit negativer Energie gebunden sind. Dem Leitungsband entsprechen die freien Zustände mit positiver Energie. Getrennt sind der Diracsee und die freien Zustände durch eine Bandlücke von etwa 1.02 MeV (doppelte Ruheenergie des Elektrons).

Bei all diesen Systemen erscheint die Bandlücke als die topologisch wichtige Eigenschaft, dem ist aber nicht so. Tatsächlich wird die Topologie der Systeme durch die mathematische Struktur der zugrundeliegenden Hilbert-Räume bestimmt, die auch die Größe der Bandlücke beeinflusst. Der Hilbert-Raum wird von Basisvektoren aufgespannt, deren Linearkombinationen die Wellenfunktionen und damit die elektronische Kristallstruktur bilden. Da sich in kristallinen Festkörpern der Vektor \mathbf{k} wie eine Erhaltungsgröße verhält, ist \mathbf{k} geeignet als Quantenzahl und man kann die Wellenfunktionen als Abbildung vom k -Raum in eine Mannigfaltigkeit des Hilbert-Raums ansehen (vgl. auch [2]). Daher bestimmt die Topologie des Hilbert-Raums auch die Topologie der elektronischen Kristallstruktur und damit die elektronische Grenzfläche zu Materialien mit einem topologisch andersartigen Hilbert-Raum.

Für die topologische Klassifikation der hier betrachteten 3D-Systeme Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 ist die Invarianz des Blochhamiltonian bezüglich einer Zeitumkehr essentiell [75]. Die Zeitumkehr ist die Spiegelung des Systems in der Zeit t , d. h. aus t wird $-t$. In Analogie zu niederdimensionalen Systemen kann eine nicht-triviale Topologie vorhanden sein, wenn im System eine Zeitumkehrsymmetrie (engl. *time reversal symmetry*, kurz TRS) vorliegt [1]. Der zur TRS zugehörige Operator lautet für Elektronen (Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen) $\Theta = \exp[i\pi\hat{S}/\hbar]\hat{K}$, wobei \hat{S} der Spinoperator, \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und \hat{K} der Operator für die komplexe Konjugation ist. Ein Blochhamiltonian $\hat{H}(\mathbf{k})$ mit TRS ist

kommensurabel mit Θ , wobei beide miteinander kommutieren: $[\hat{H}, \Theta] = 0$. Es wird dabei die Beziehung $\Theta \hat{H}(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = \hat{H}(-\mathbf{k})$ erfüllt, sodass für die Energiebänder $E_n(\mathbf{k})$ hieraus das sogenannte *Kramerstheorem*

$$E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \downarrow) \quad (4.2)$$

folgt. Dabei repräsentiert \uparrow, \downarrow den Spinzustand (up, down). Offensichtlich existiert für einen Energiezustand bei einem \mathbf{k} mit Spin \uparrow ein energetisch gleicher Zustand bei $-\mathbf{k}$ mit Spin \downarrow , wenn die Bandstruktur die TRS erfüllt. Man nennt diese Energiepaare Kramerspaare. Da der Spin zweier entgegengesetzter k -Punkte ebenfalls entgegengesetzt sein muss, folgt hieraus eine feste Beziehung zwischen k -Punkt und Spinstellung bei TI. Man sagt daher auch: k -Vektor und Spin sind zueinander gelockt.

In der BZ gibt es spezielle k -Punkte (hier Λ -Punkte genannt), für die aufgrund der Randperiodizität der BZ $\mathbf{\Lambda} + \mathbf{G} = -\mathbf{\Lambda}$ gilt. Dabei ist \mathbf{G} der reziproke Gittervektor des Systems. In diesen Λ -Punkten ergibt sich nach dem Kramerstheorem an einem einzelnen k -Punkt eine zweifache Entartung der Energie: $E(\mathbf{\Lambda}, \uparrow) = E(\mathbf{\Lambda}, \downarrow)$. Man nennt daher die Λ -Punkte zeitumkehrinvariante Momente der BZ oder kurz TRIM (engl. *time reversal invariant momentum*). Im Fall von 3D TI gibt es innerhalb der BZ acht TRIM (siehe auch Bild 4.9). So liegt beispielsweise bei $\mathbf{k} = (0,0,0)$ (sogenannter Γ -Punkt) immer ein TRIM vor. Im Folgenden werden gemäß [75] die Λ -Punkte normiert auf die BZ als $\mathbf{\Lambda}_i$ bezeichnet, die sich folgendermaßen aus den primitiven Basisvektoren \mathbf{b} des reziproken Gitters ergeben:

$$\mathbf{\Lambda}_{i=(\beta_1\beta_2\beta_3)} = \beta_1 \mathbf{b}_1 + \beta_2 \mathbf{b}_2 + \beta_3 \mathbf{b}_3. \quad (4.3)$$

Der Index i ist dabei ein Tripel aus den entsprechenden Vorfaktoren β der \mathbf{b} -Vektoren, bezogen auf die BZ, die nur die Werte 0 und 1 annehmen. Es gibt also in der BZ folgende TRIM: $\mathbf{\Lambda}_{000}, \mathbf{\Lambda}_{100}, \mathbf{\Lambda}_{010}, \mathbf{\Lambda}_{001}, \mathbf{\Lambda}_{110}, \mathbf{\Lambda}_{101}, \mathbf{\Lambda}_{011}$ und $\mathbf{\Lambda}_{111}$. Für die Projektion der Λ -Punkte auf Flächen der BZ *senkrecht* zu \mathbf{G} wird das Symbol λ verwendet, wobei je zwei Λ -Punkte (Abstand $\mathbf{G}/2$) auf einen λ -Punkt fallen.

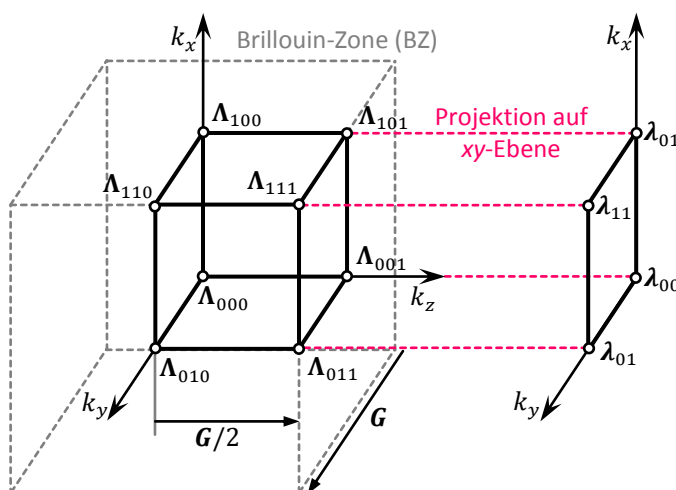


Bild 4.9| TRIM in der BZ. In einem 3D TI gibt es in der BZ insgesamt acht TRIM (hier BZ eines kubisches Kristallgitters). Bei einer Projektion senkrecht zum Gittervektor \mathbf{G} fallen zwei TRIM $\mathbf{\Lambda}$ (Abstand $\mathbf{G}/2$) zu einem Oberflächen-TRIM $\mathbf{\lambda}$ zusammen. Darstellung nach [75].

Für topologische Materialien mit einer Inversionssymmetrie der Kristallstruktur (wie bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3) lässt sich anhand der Parität der besetzten Zustände an den TRIM die Topologie bestimmen. Die Inversion am Inversionszentrum (Γ -Punkt) ist mit \hat{P} als Paritätsoperator durch $\hat{P}|u(\mathbf{k})\rangle = p|u(\mathbf{k})\rangle$ gegeben. Der Eigenwert $p = \pm 1$ von \hat{P} ist die sogenannte Parität p der Zustände: $p = +1$ heißt gerade Parität und $p = -1$ ungerade Parität. Allgemein wird für die Bestimmung der Topologie zunächst der Zeitumkehroperator als unitäre $2N \times 2N$ -Matrix $w_{nm}(\mathbf{k})$ in der Basis der besetzten Blochzustände $|u(\mathbf{k})\rangle$ dargestellt ($2N$ ist die Zahl der besetzten Bänder und n und m sind die Bandindizes):

$$w_{nm}(\mathbf{k}) = \langle u_m(-\mathbf{k}) | \Theta | u_n(\mathbf{k}) \rangle. \quad (4.4)$$

Da Θ antiunitär ist und $\Theta^2 = -\mathbf{1}$ gilt, folgt $w_{mn}(-\mathbf{k}) = -w_{nm}(\mathbf{k})$. An den TRIM Λ_i wird aus $w_{nm}(\mathbf{k})$ eine antisymmetrische Matrix $w_{mn}(\Lambda_i) = -w_{nm}(\Lambda_i)$. Die Determinante $\text{Det}[w(\Lambda_i)]$ einer antisymmetrischen Matrix ist das Quadrat der entsprechenden Pfaffschen Determinante $\text{Pf}[w(\Lambda_i)]$, sodass man folgenden Ausdruck definieren kann: $\delta(\Lambda_i) = \text{Pf}[w(\Lambda_i)] \cdot \text{Det}[w(\Lambda_i)]^{-1/2} = \pm 1$. Für Systeme mit Inversionssymmetrie wurde in [75] gezeigt, dass man $\delta(\Lambda_i)$ auch einfach durch die Paritäten p der insgesamt $2N$ besetzten Bänder an den TRIM Λ_i darstellen kann:

$$\delta(\Lambda_i) = \prod_{m=1}^N p_{2m}(\Lambda_i). \quad (4.5)$$

Im Produkt wird mit $2m$ jeder zweite Paritätswert übersprungen, da benachbarte Blochzustände an den TRIM aufgrund des Kramerstheorems entartet sind und daher die gleiche Parität haben: $p_{2m}(\Lambda_i) = p_{2m+1}(\Lambda_i)$. Aus den $\delta(\Lambda_i)$ der jeweiligen TRIM Λ_i können Produkte gebildet werden, die einen festen Wert für eine bestimmte Topologie der Bandstruktur ergeben. Die Produkte lauten [2]

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{i=1}^8 \delta(\Lambda_i) \quad \text{und} \quad (-1)^{\nu_j} = \prod_{\substack{i_j=1 \\ i_k \neq j=0,1}} \delta(\Lambda_i) \quad (4.6)$$

mit $j = 1, 2, 3$. ν_1 ist z. B. durch $(-1)^{\nu_1} = \delta(\Lambda_{100})\delta(\Lambda_{110})\delta(\Lambda_{101})\delta(\Lambda_{111})$ gegeben. Die resultierenden Zahlen ν_0, ν_1, ν_2 und ν_3 sind die topologischen Invarianten, die die Topologie der 3D TI charakterisieren. Man fasst sie üblicherweise in der Schreibweise $(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3)$ zusammen. Für die Invariante ν_0 werden die Paritätsprodukte aller TRIM in der BZ benötigt, daher kann man bei ν_0 von einer Eigenschaft des reinen 3D Systems sprechen. Die ν_j werden durch die Paritätsprodukte von nur vier TRIM gebildet und können als topologische Invarianten der durch diese vier TRIM begrenzten Fläche interpretiert werden. Sind alle Invarianten null (0; 000), so handelt es sich um einen trivialen Isolator. Ist $\nu_0 = 0$ und mindestens ein $\nu_j = 1$, spricht man von einem schwachen (engl. *weak*) TI. Bei $\nu_0 = 1$ spricht man von einem starken (engl. *strong*) TI. Da die Topologie über Gleichung (4.6) von den Paritätsprodukten $\delta(\Lambda_i)$ der besetzten Bänder an den TRIM Λ_i abhängt, lässt sich die Topologie hierüber verändern.

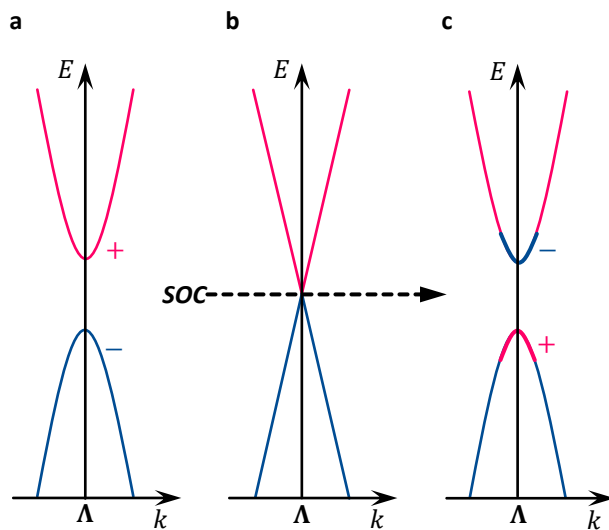


Bild 4.10 | Evolution von der trivialen zur topologischen Bandstruktur.

In Abhängigkeit der Stärke der Spin-Bahn-Wechselwirkung SOC in einem Material kann (a) die ursprüngliche triviale Ordnung der Bänder an den TRIM Λ durch (b) Schließen der Bandlücke (kritischer Punkt) invertiert werden, sodass (c) ein topologischer Isolator vorliegt. Zeichnung nach [3].

Treibende Kraft für die Veränderung des topologischen Zustands der Bandstruktur kann wie bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 die Spin-Bahn-Kopplung (engl. *spin orbit coupling*, kurz SOC) sein, die die Bänder in ihrer energetischen Lage verschiebt [3]. So kann beispielsweise aus einer eigentlich topologisch trivialen Bandstruktur eines Isolators (siehe Bild 4.10) durch die SOC die Bandlücke invertiert werden. Je nachdem welche Parität das oberste Valenzband und das unterste Leitungsband an den einzelnen TRIM haben und an welchen TRIM es zu einer Bandinversion kommt, können sich die Paritätsfolgen für die besetzten Zustände an einzelnen oder mehreren TRIM ändern und es entstehen neue Paritätsprodukte δ_i . Je nach der Veränderung der δ_i kann daher ein eigentlich triviales Material aufgrund der SOC zu einem topologischen Isolator werden, d. h., es findet ein Quantenphasenwechsel von der trivialen in die topologische Phase statt.

4.3.3 Topologische Grenzflächenzustände

Zuvor wurde erläutert, dass eine Bandinversion an bestimmten TRIM in der BZ eines ursprünglich trivialen Isolators für eine Änderung der Topologie der Bandstruktur sorgen kann, d. h., es findet ein Wechsel vom trivialen Isolator zum topologischen Isolator statt. Kommt nun ein 3D TI mit einem Material in Berührung, das eine triviale Bandstruktur aufweist, muss zwischen beiden Materialien ein Wechsel in der Topologie stattfinden. Dieser Wechsel erfolgt nicht abrupt, sondern es gibt einen Übergang in Form eines Grenzflächenzustands. Dieser verbindet die topologische und die trivialen Bandstruktur, indem er das oberste Valenzband bzw. unterste Leitungsband im TI mit dem untersten Leitungsband bzw. obersten Valenzband im trivialen Material verbindet. Analog zu Bild 4.10 kann hierdurch die Topologie verändert werden, wobei die Bandlücke notwendigerweise geschlossen wird. Daher hat der Grenzflächenzustand zwangsweise einen metallischen Charakter.

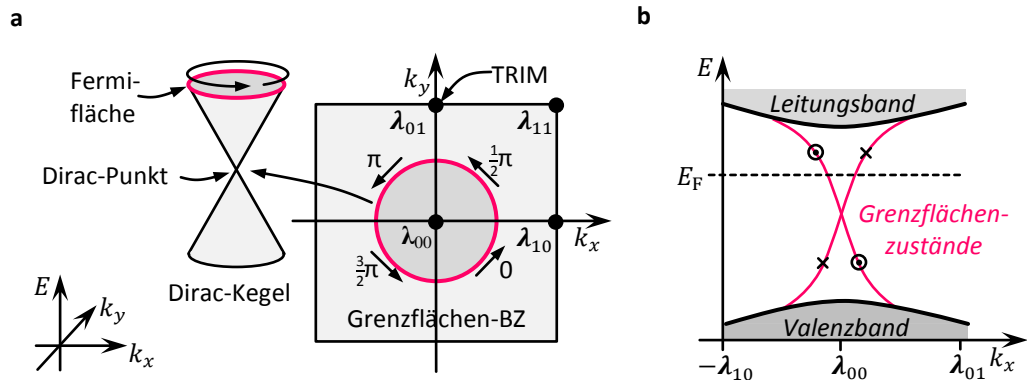


Bild 4.11 | Grenzflächenzustände bei einem starken 3D TI mit kubischem Gitter. (a) Brillouinzone (BZ) der Grenzfläche. In diesem Beispiel ist der einfachste Typus eines starken TI dargestellt, der nur einen einzelnen Dirac-Punkt als Grenzflächenzustand in der Grenzflächen-BZ enthält. (b) Bandstruktur des Grenzflächenzustands am Grenzflächen-TRIM λ_{00} . Bild nach [5].

Da der Grenzflächenzustand Folge des Topologieunterschiedes ist, bleibt er so lange erhalten, wie auch die Topologie des TI unverändert bleibt. Daher sind die Grenzflächenzustände im TI äußerst stabil gegenüber nichtmagnetischen Defekten. Die Grenzflächen-BZ besitzt vier Grenzflächen-TRIM λ (vgl. Bild 4.11a). Der Bandlückenschluss findet an einem dieser TRIM statt (in Bild 4.11a bei λ_{00}) [5]. Aufgrund des Kramerstheorems (Gleichung (4.2)) muss im Grenzflächenzustand bei jedem Paar \mathbf{k}_{\parallel} und $-\mathbf{k}_{\parallel}$ auf der Grenzfläche die zugehörigen Spins entgegengesetzt sein. Außerdem muss sich der Grenzflächenzustand am Grenzflächen-TRIM zweifach entarten. Im einfachsten Fall (vgl. Bild 4.11) bildet der Grenzflächenzustand einen sogenannten Dirac-Kegel in der Nähe des Entartungspunkts am TRIM aus, den man auch als Dirac-Punkt bezeichnet. Man nennt den Grenzflächenzustand deshalb Dirac-Kegel, da man die lineare Dispersion des Zustands durch eine modifizierte Dirac-Gleichung beschreiben kann, bei der die Elektronen wie masselose Fermionen behandelt werden.

Die Fläche konstanter Energie (engl. *constant energy contour*, kurz CEC) des Dirac-Kegels ist kreisförmig (siehe Bild 4.11a) und aufgrund des Kramerstheorems spinpolarisiert (der Spin vollführt eine Drehung von 2π bei einem Umlauf um die Fermifläche, vgl. Bild 4.11a). Daher ist eine direkte elastische Rückstreuung um π an nichtmagnetischen Defekten im Grenzflächenzustand unmöglich, da hierfür ein Spinflip notwendig wäre. Jedoch sind andere Streuprozesse (elastische wie inelastische) möglich, bei denen die Spins von Anfangs- und Endzustand nicht entgegengesetzt sind [76], wobei die Übergangswahrscheinlichkeit für solche Streuprozesse von der Spinstellung des Anfangs- und des Endzustand zueinander bestimmt wird (für entgegengesetzte Spins beträgt sie 0 und wird für zueinander parallele Spins maximal). Damit ist die Streuung insgesamt im Grenzflächenzustand des TI geringer als bei einem trivialen Material.

Reale Grenzflächenzustände haben im Allgemeinen eine deutlich komplexere Form, die sich z.B. durch Einschnürungen im Dirac-Kegel bemerkbar macht. Hierdurch kann die Wahrscheinlichkeit für Streuprozesse erhöht werden, so dass die Streuung im TSS zunimmt.

4.4 Elektronische Eigenschaften von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3

Bereits 2004, also noch vor der Entwicklung des theoretischen Konzepts für topologische Isolatoren (TI) im Jahr 2005, stellten Urazhdin et al. [77] mithilfe von STM- und STS-Messungen fest, dass Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 innerhalb ihrer Bandlücke an der Oberfläche Zustände aufweisen, die einen Leitungsbandcharakter haben. Im Jahr 2009 wurde durch Zhang et al. [9] theoretisch gezeigt, dass Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 3D TI sind und einen metallischen Oberflächenzustand mit einem Dirac-Kegel ausbilden sollten. Im gleichen Jahr wurde dies sowohl experimentell als auch durch weitere Berechnungen für Bi_2Se_3 durch Xia et al. [10] und für Bi_2Te_3 gleichzeitig durch Chen et al. [11] und Hsieh et al. [78] bestätigt.

4.4.1 Bandstruktur

Sowohl Bi_2Se_3 als auch Bi_2Te_3 sind indirekte Halbleiter mit einer kleinen Bandlücke von etwa 300 meV bzw. 170 meV [2] und gehören zu den thermoelektrischen Materialien [10]. Wegen Gitterfehlstellen neigen Bi_2Se_3 bzw. Bi_2Te_3 dazu, als Volumenmaterial n- bzw. p-dotiert zu sein [79]. Beide Systeme kristallisieren im gleichen rhomboedrischen Gitter (siehe auch Bild 4.5, Raumgruppe $R\bar{3}m$ und Punktgruppe D_{3d}), sodass beide Systeme die gleiche Brillouinzone (BZ) haben (vgl. Bild 4.12). Innerhalb der BZ bilden die folgenden k -Punkte die acht zeitumkehrinvarianten Momente (TRIM): Γ (entspricht Λ_{000}), Z (entspricht Λ_{111}), F (insgesamt dreimal in der BZ vorhanden, entspricht Λ_{100} , Λ_{010} und Λ_{001}) und L (insgesamt dreimal in der BZ vorhanden, entspricht Λ_{110} , Λ_{101} und Λ_{011}). Da in dieser Arbeit die (111)-Oberfläche der Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Schichten untersucht wird, ist in Bild 4.12 zusätzlich die entsprechende Grenzflächen-BZ eingezeichnet. Sie enthält vier Oberflächen-TRIM, nämlich $\bar{\Gamma}$ (entspricht λ_{00}) und \bar{M} (insgesamt dreimal in der Grenzflächen-BZ, entspricht λ_{10} , λ_{01} und λ_{11}).

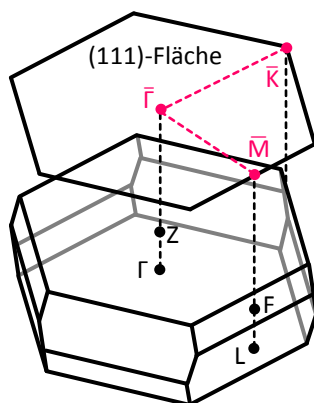


Bild 4.12 | Brillouin-Zone für die rhomboedrische Einheitszelle von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 . In der BZ sind die acht TRIM eingezeichnet (F und L kommen insgesamt dreimal in der BZ vor). Außerdem ist die Projektion der BZ auf die (111)-Fläche mit den zugehörigen Grenzflächen-TRIM $\bar{\Gamma}$ und \bar{M} (insgesamt dreimal in der Grenzflächen-BZ) eingezeichnet. Die gestrichelte Linie in der Oberflächen-BZ gibt den Richtungsverlauf der Bandstruktur in Bild 4.14 wieder. Darstellung aus [10].

Zhang et al. [9] geben aus theoretischen Berechnungen für die Paritätsprodukte $\delta(\Lambda_i)$ an den einzelnen TRIM in der BZ sowohl für Bi_2Se_3 als auch für Bi_2Te_3 folgende Werte an: $\delta(\Gamma) = -1$, $\delta(\mathbf{Z}) = +1$, $\delta(\mathbf{F}) = +1$ und $\delta(\mathbf{L}) = +1$. Einsetzen der $\delta(\Lambda_i)$ in Gleichung (4.6) liefert $(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3) = (1; 000)$, d. h. bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 handelt es sich tatsächlich um starke 3D TI.

Analog zu Zhang et al. [9] wird im Folgenden am Beispiel des Γ -Punkts von Bi_2Se_3 die Evolution der atomaren Orbitale zur Bandstruktur des TI verdeutlicht (siehe auch Bild 4.13). An den Energieniveaus nahe der Bandlücke (gekennzeichnet durch die Fermienergie E_F) sind in Bi_2Se_3 vornehmlich das 6p-Niveau von Bi ($6s^2 6p^3$) sowie das 4p-Niveau von Se ($5s^2 4p^4$) beteiligt. Im Bi_2Se_3 -Kristall gehen Bi und Se Bindungen ein. Daher werden die atomaren Niveaus zu Hybridorbitalen aufgespalten, die sich anhand der Parität unterscheiden. Das 6p-Orbital in Bi bildet je ein Hybridorbital mit gerader und ungerader Parität aus, die gegenüber dem ursprünglichen 6p-Niveau energetisch höher liegen. Das 4p-Orbital in Se bildet drei Hybridorbitale (zwei mit ungerader und eines mit gerader Parität) aus, wobei die Hybridorbitale energetisch tiefer liegen als das 4p-Orbital. In Bild 4.13 werden die durch die chemische Bindung entstandenen fünf Hybridorbitale von Bi und Se mit $|P1_{x,y,z}^{\pm}\rangle$, $|P2_{x,y,z}^{\pm}\rangle$ und $|P0_{x,y,z}^{\pm}\rangle$ bezeichnet. Die Indizes bezeichnen mit \pm die Parität und mit x,y,z die Symmetrie des Zustands.

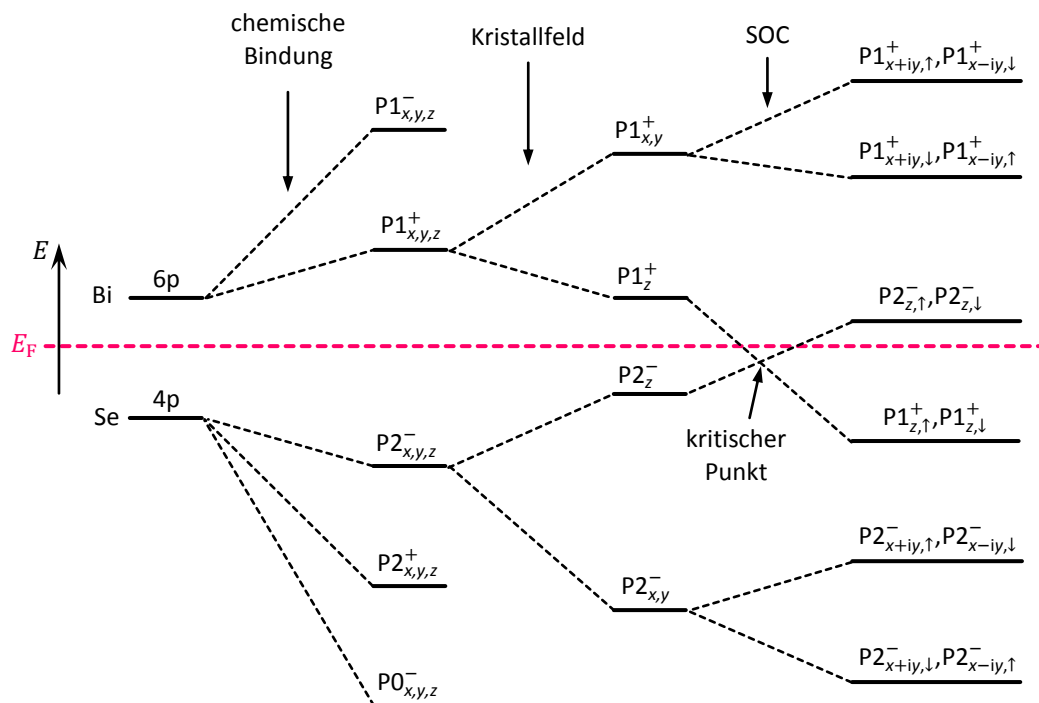


Bild 4.13 | Schematische Evolution der Bandstruktur von Bi_2Se_3 aus den atomaren p-Orbitalen von Bi und Se am Γ -Punkt. Das 6p- und das 4p-Orbital von Bi und Se werden in Folge der chemischen Bindung und des Kristallfeldes in Bi_2Se_3 anhand ihrer Paritäten und Richtungsanteile (oberer und unterer Index der Termsymbole) aufgespalten. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung (SOC) sorgt schließlich für einen Wechsel der Paritätsfolge am TRIM, der eine Konversion vom trivialen Bandisolator zum TI bewirkt. Diagramm nach [9].

Das Bi₂Se₃-Kristallgitter mit seinen positiv geladenen Atomrümpfen erzeugt ein sogenanntes Kristallfeld, das mit den negativ geladenen Orbitalen der Hybridzustände elektrostatisch wechselwirkt. Die verschiedenen Symmetrieteile der Hybridzustände wechselwirken unterschiedlich mit dem Kristallfeld und führen zu einer weiteren Aufspaltung der Hybridzustände. Dabei werden sowohl bei Bi als auch bei Se die p_z -Orbitale von den p_x - und p_y -Orbitalen getrennt, die entartet bleiben. Im Kristallfeld werden die p_z -Orbitale von Bi bzw. Se energetisch erniedrigt bzw. erhöht und bilden die zur Fermienergie E_F nächsten Orbitale $|P1_z^+\rangle$ und $|P2_z^-\rangle$, d. h. das unterste Leitungsband und das oberste Valenzband. Dabei weisen die Zustände einander gegenüber unterschiedliche Paritäten auf.

Zuletzt muss noch die Spin-Bahn-Kopplung (SOC) berücksichtigt werden. Sie verknüpft in Bi₂Se₃ Bahndrehmoment und Spinmoment der Orbitalelektronen derart, dass das Gesamtdrehmoment erhalten bleibt [9]. Dies führt zu einer Abstoßung zwischen $|P1_z^+, \uparrow\rangle$ und $|P1_{x+iy}^+, \uparrow\rangle$ sowie analogen Paaren. Dabei werden die $|P1_z^+, \uparrow(\downarrow)\rangle$ -Niveaus durch die SOC energetisch erniedrigt und die $|P2_z^-, \uparrow(\downarrow)\rangle$ -Niveaus energetisch erhöht, sodass durch die SOC die zur Fermienergie nächsten Niveaus ihre energetische Lage austauschen (kritischer Punkt in Bild 4.13). Hierdurch geschieht ein Wechsel der Paritätsfolge am Γ -Punkt, der einen TRIM der BZ darstellt. Daher findet der Phasenübergang vom trivialen zum topologischen Isolator bei Bi₂Se₃ am Γ -Punkt in Folge der SOC statt. Für Bi₂Te₃ kann man eine analoge Entwicklung am Γ -Punkt erwarten.

Bild 4.14 zeigt die elektronische Struktur von Bi₂Se₃ (Bild 4.14a) und Bi₂Te₃ (Bild 4.14b) entlang der in Bild 4.12 in die Oberflächen-BZ eingezeichneten Verbindungslinie. Die Bandstrukturen von Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ in Bild 4.14 stammen aus Berechnungen von Zhang et al. [9] für die (111)-Oberfläche in Kontakt mit dem Vakuum. Bei beiden Materialien werden Leitungs- und Valenzband miteinander an der Oberfläche durch einen topologischen Oberflächenzustand (engl. *topological surface state*, kurz TSS) verbunden, dessen Dirac-Punkt sich am Oberflächen-TRIM $\bar{\Gamma}$ befindet, wie man es aufgrund der Bandinversion bei Γ vermuten kann. Beide Modellrechnungen wurden durch eine Vielzahl an Experimenten wie STM (siehe z. B. [80]), ARPES (engl. *angle resolved photoelectron spectroscopy*, deutsch »winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie«; z. B. [11]) oder optische Untersuchungen (z. B. [81]) bestätigt.

Im Fall von Bi₂Se₃ (siehe Bild 4.14a) wird ein nahezu idealer Dirac-Kegel im TSS ausgebildet. Der TSS ist recht symmetrisch und einfach aufgebaut, wie man von $\bar{\Gamma}$ aus gesehen in Richtung \bar{M} und \bar{K} erkennen kann. Außerdem liegt der Dirac-Punkt über dem Valenzband innerhalb der Bandlücke von Bi₂Se₃. Im Fall von Bi₂Te₃ (siehe Bild 4.14b) zeigt der TSS eine deutlich komplexere Struktur. Der TSS ist sehr asymmetrisch aufgebaut, wie man von $\bar{\Gamma}$ aus gesehen in Richtung \bar{M} und \bar{K} erkennen kann. Außerdem zeigt er keine einfache kegelartige Struktur, sondern bildet am Valenzband Falten. Der Dirac-Punkt liegt unterhalb der höchsten Valenzbandkante in einer Bandmulde des Valenzbandes, sodass sich im Gegensatz zum Bi₂Se₃ weitere Streukanäle durch das Valenzband sowie durch die gefaltete Struktur des TSS ergeben.

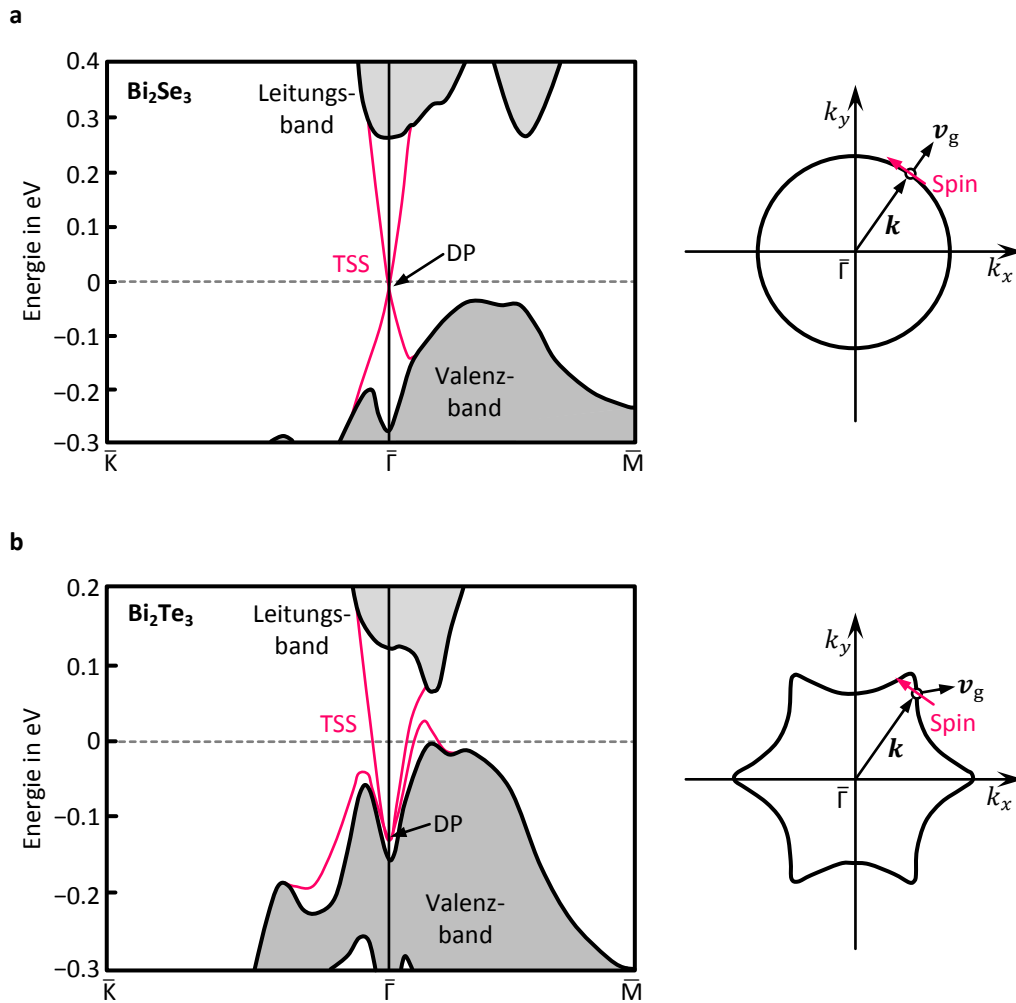


Bild 4.14 | Elektronische Struktur an der Oberfläche von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 . Gezeigt werden jeweils die Bandstruktur der (111)-Oberfläche von \bar{K} über $\bar{\Gamma}$ bis \bar{M} sowie eine beispielhafte Fläche konstanter Energie (CEC) im topologischen Oberflächenzustand (TSS) nahe dem Dirac-Punkt (DP) für Bi_2Se_3 (a) und Bi_2Te_3 (b). Dabei ist $E_F = 0$ gesetzt. Bei Bi_2Se_3 ist der TSS nahezu als idealer Dirac-Kegel nahe dem DP ausgebildet. Bi_2Te_3 hat einen deutlich komplexeren TSS. Die gezeigten Bandstrukturen stammen aus Berechnungen von Zhang et al. [9] und die CEC aus [2].

Bild 4.14 enthält beispielhafte Flächen konstanter Energie (CEC) durch den Dirac-Kegel im TSS von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 . Hier setzt sich das Bild fort, das schon die jeweiligen Bandstrukturen zeigten: Nahe dem Dirac-Punkt liegt bei Bi_2Se_3 ein sehr symmetrischer, fast idealer Dirac-Kegel vor (Bild 4.14a) während bei Bi_2Te_3 sich in der CEC Einschnürungen (engl. *warping*) zeigen. Fern vom Dirac-Punkt weist aber auch Bi_2Se_3 ein solches Warping [82] auf. Bedingt durch das Kramerstheorem stehen k -Vektor und Spin im TSS zueinander immer senkrecht. Die Gruppengeschwindigkeit \mathbf{v}_g , die man Elektronen in der Bandstruktur zuordnet, ist im Energieband $E(\mathbf{k})$ an der Stelle \mathbf{k} durch $\mathbf{v}_g = 1/\hbar \cdot \nabla E(\mathbf{k})$ gegeben. Sind Gruppengeschwindigkeit und Spin aufgrund des Warpings im TSS nicht mehr orthogonal, werden weitere Streukanäle ermöglicht. Dies macht sich z. B. in Quasipartikelinterferenzen an nichtmagnetischen Streuern bemerkbar [83].

4.4.2 Quantenphasendiagramm

Für die Ausbildung der topologischen Phase in Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ ist neben der zuvor besprochenen Spin-Bahn-Kopplung (SOC) auch die Schichtdicke t wichtig. Dies wurde durch Wu et al. [81] mittels THz-Spektroskopie am Materialsystem (In_{1-x}Bi_x)₂Se₃ demonstriert. In Bild 4.15 ist die vorhandene topologische Phase des Materialsystems in Abhängigkeit des Anteils x an Indium (In) und der Schichtdicke t aufgetragen (Quantenphasendiagramm). Je mehr In im Material vorliegt, desto schwächer wird die SOC und die Bandlücke im Material wird kleiner. Ab einem Indiumanteil von $x = 6\%$ ist die SOC so weit abgeschwächt, dass es über eine Bandinversion zu einem Wechsel der Topologie kommt, d. h. es liegt dann ein 3D trivialer Isolator vor. Da ein TI sowohl an seiner Oberfläche zum Vakuum als auch an der Grenzfläche zum (trivialen) Substrat einen Grenzflächenzustand bildet, kommt es ab einer kritischen Schichtdicke (z. B. in Bild 4.15 bei $t < 6$ QL) zu einer Hybridisierung beider Grenzflächenzustände, die zu einer Bandlücke in den Grenzflächenzuständen führt (sogenannter Hybrid-TI). Ist die Hybridisierung zu stark (ca. ab $t = 2$ QL), kommt es zu einer Bandinversion und es liegt ein trivialer 2D Isolator vor. Dabei beträgt die Eindringtiefe des Grenzflächenzustands in Bi₂Se₃ ($x = 0$) etwa 2.7 QL und wächst mit steigendem Indiumanteil x für (In_{1-x}Bi_x)₂Se₃, sodass auch die kritische Schichtdicke für den Hybrid TI wächst (vgl. Verlauf der Grenze Hybrid-TI/3D TI in Bild 4.15).

Ein vergleichbares Quantenphasendiagramm steht meiner Kenntnis nach für Bi₂Te₃ in der Literatur bisher nicht zur Verfügung. Jedoch treffen die vorherigen Aussagen bezüglich der Schichtdickenabhängigkeit auch bei Bi₂Te₃ zu: Die Eindringtiefe des Grenzflächenzustands beträgt etwa 1 QL, sodass Filme mit einer Dicke von 1 QL einen trivialen 2D Isolator, Filme mit einer Dicke bis 2 QL einen Hybrid-TI und Filme mit einer Dicke über 2 QL einen 3D TI bilden [58].

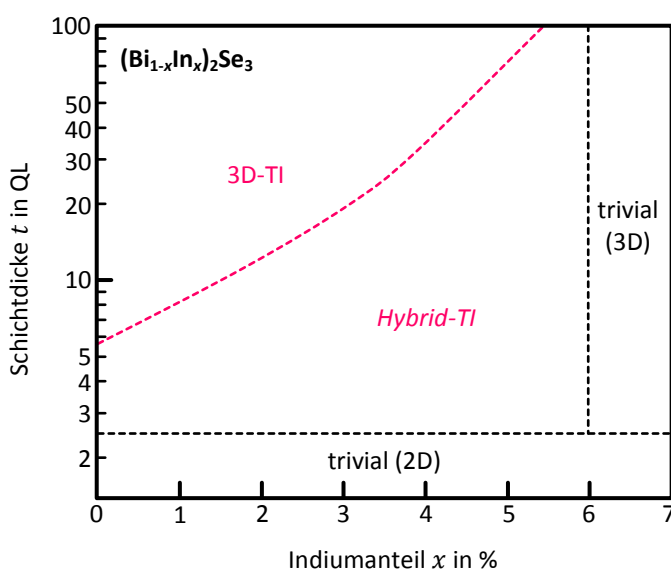


Bild 4.15 | Quantenphasendiagramm von (Bi_{1-x}In_x)₂Se₃. Topologischer Zustand des Systems in Abhängigkeit von Schichtdicke t und Indiumanteil x . Diagramm aus [81].

4.4.3 Elektrischer Transport

Ein äußerst wichtiges Merkmal für die in dieser Arbeit betrachteten Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Filme ist ihr Schichtleitwert G , der sich gemäß Gleichung (2.43) aus der Leitfähigkeit des Filmvolumens (Leitfähigkeit σ_{3D} und Dicke t) sowie Transportkanälen auf der Grenzfläche des Films (Leitfähigkeit σ_{2D}) zusammensetzt:

$$G = \sigma_{3D} \cdot t + \sigma_{2D}. \quad (4.7)$$

Die Transportkanäle σ_{2D} bestehen in realen Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Proben nicht nur aus dem topologischen Oberflächenzustand (TSS). So kann es zum Beispiel bei Bi_2Se_3 durch eine Bandverbiegung an der Oberfläche zur Ausbildung eines Oberflächenzustands in der Form eines 2D Elektronengases (2DEG) kommen [84]. Bei Bi_2Te_3 konnte die Ausbildung zusätzlicher Quantentröge (engl. *quantum wells*) nach der Adsorption von Stickstoff auf der Oberfläche beobachtet werden [85]. Da der TI gegenüber allen trivialen Materialien mit der Ausbildung eines topologischen Zustands reagiert, ist der TSS dort nicht nur auf die dem Vakuum zugewandten Oberfläche begrenzt, sondern umschließt den gesamten TI, einschließlich der Grenzfläche zu einem trivialen Substrat. Da an der Grenzfläche zum Substrat auch andere Ladungsträgerdichten auftreten können, kann in Abhängigkeit der Leitungsträgerkonzentration die Leitfähigkeit des TSS dort ebenfalls erhöht oder erniedrigt sein. Dies wurde z. B. von Steinberg et al. [86] für von Bi_2Se_3 -Schichten gezeigt, die auf oxidierte Si-Substrate exfoliiert wurden.

Tabelle 4.3 gibt eine Übersicht über die Leitfähigkeit σ_{2D} der Grenzfläche von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 . Angegeben sind Proben aus verschiedenen Publikationen, die entweder als Film, Kristallprobe (einschließlich von Kristallen exfoliierte Schichten) oder Kristallnadeln vorlagen. Neben σ_{2D} ist jeweils auch die Ladungsträgerdichte n_{2D} und die Mobilität μ_{2D} der Ladungsträger auf der Grenzfläche der einzelnen Probe angegeben. Da nicht bei allen Publikationen σ , n oder μ angegeben waren, wurden fehlende Werte anhand der Gleichung $\sigma = en\mu$ berechnet. Sieht man sich Tabelle 4.3 an, so fällt zunächst auf, dass die Ladungsträgerdichte auf der Grenzfläche unabhängig von Materialform und Materialdicke sowohl bei Bi_2Se_3 als auch bei Bi_2Te_3 Werte im Bereich $n_{2D} = 10^{11}$ - $10^{13}/\text{cm}^2$ annimmt. Auch die Mobilität ist eher unabhängig von Form und Dicke, jedoch ist der Größenbereich der Mobilität bei Bi_2Se_3 ($\mu_{2D} = 350$ - $5000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) etwa um eine Größenordnung kleiner als bei Bi_2Te_3 ($\mu_{2D} = 1000$ - $21000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$). Die Leitfähigkeiten σ_{2D} der Grenzflächen bewegen sich sowohl bei Bi_2Se_3 als auch bei Bi_2Te_3 unabhängig von der Materialform und Materialdicke im Bereich von 0.1-7.7 mS. Da in dieser Arbeit vor allem dünne Schichten an ihrer Oberfläche zum Vakuum untersucht werden, ist besonders die Leitfähigkeit σ_s (der Index s steht für engl. *surface*) auf der Vakuumseite interessant. Da die genaue Bestimmung von σ_s schwierig ist, da entweder die präparierten Proben eine besonders hohe Güte oder aber eine umfangreiche Messung erfordern (Schichtdickenabhängigkeit usw.), geben die meisten Publikationen keinen genauen Wert für σ_s an. In zwei Publikationen wurde σ_s bestimmt, nämlich in Steinberg et al. [86] für Bi_2Se_3 und in Hoefer et al. [87] für Bi_2Te_3 .

Tabelle 4.3 | Leitfähigkeit σ_{2D} für die Grenzfläche von Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃. Für jede Probe ist die Form des Materials, ihre Dicke t , die Ladungsträgerkonzentration n_{2D} , die Mobilität μ_{2D} und die Leitfähigkeit σ_{2D} auf der Grenzfläche angegeben. In einigen Publikationen waren nicht alle Transportparameter gegeben, sodass über $\sigma = en\mu$ fehlende Werte berechnet wurden (mit * gekennzeichnet). Folgende Abkürzung werden benutzt: ARPES-Messung (A), Hall-Messung (H), Vierpunktmessung (M), Schubnikov-de-Haas-Oszillation (S) und Volumenleitung (VL).

Bi ₂ Se ₃	t in nm	n_{2D} in $10^{12}/\text{cm}^2$	μ_{2D} in $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	σ_{2D} in mS	Ref.	Methode	Bemerkung
Film	2-243	30	500	2.4*	[88]	H/M	
	6	0.4	5000	0.3	[89]	H	wenig VL
	6	7	360*	0.4	[90]	H	
	6	32	350	1.8*	[91]	A/M	
	10	1	4500	0.1	[92]	H	
	15	33	440	2.3*	[93]	H	
Kristall	11	0.4-4	320-1500	0.1-0.2	[94]	H	wenig VL
	6-38	4.1	850	0.6*	[95]	H	
	20-80	40	1000	7.7	[86]	H/M	σ_s ermittelt
Nadel	150	1.8	3020	0.9*	[96]	S	
Bi ₂ Te ₃	t in nm	n_{2D} in $10^{12}/\text{cm}^2$	μ_{2D} in $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	σ_{2D} in mS	Ref.	Methode	Bemerkung
Film	6	1.4	4800	1.1*	[97]	S	
	10-20	ca. 2.5	ca. 1000	0.6-0.8	[87]	A/M	fast keine VL
Kristall	35-50	2.3	2700	1.0*	[98]	S	
	> 1000	2	1400	0.5*	[99]	H	kaum VL
	> 1000	1.6*	10200	2.6	[100]	S	
	>> 1000	0.4	2200	0.1	[101]	S	
Nadel	ca. 35	4.9	3300	2.6*	[102]	S	
	ca. 100	0.2	21000	0.7*	[103]	S	
	ca. 185	1.1	5000	0.9*	[104]	S	

Steinberg et al. [86] haben zunächst aus einem Bi₂Se₃-Kristall Schichten unterschiedlicher Dicke exfoliert und aus der dickenabhängigen Auftragung ihrer Schichtleitwerte eine Grenzflächenleitfähigkeit von $\sigma_{2D} = 7.7 \text{ mS}$ bestimmt. Über Leitfähigkeitsmessungen, bei denen mittels Steuerelektronen die Ladungsträgerkonzentrationen auf der Oberfläche und der Grenzfläche zum Substrat der Proben variiert wurden, konnte $\sigma_s = 0.4\text{-}0.8 \text{ mS}$ bestimmt werden.

Hoefer et al. [87] haben für Bi₂Te₃ einen anderen Weg gewählt, indem sie Bi₂Te₃-Filme mit äußerst geringer Zahl an Te-Fehlstellen hergestellt haben. Hierfür wurde bei 250 °C auf ein BaF₂(111)-Substrat (sehr ähnliche Gitterkonstante wie Bi₂Te₃, d. h. wenig Gitterfehlpassung) Bi und Te aufgedampft, wobei Te noch bis zu einer Substrattemperatur von 170 °C (minimale Abdampf-temperatur von Te aus dem Film) auf den gewachsenen Film gedampft wurde. Mittels ARPES wurde ersichtlich, dass sich das chemische Potential innerhalb der Bandlücke (kaum Volumenleitung) und an der Oberfläche innerhalb des TSS befindet. Mittels Vierpunktmessungen auf der Oberfläche des Films konnte die Oberflächenleitfähigkeit bei Raumtemperatur zu etwa $\sigma_s = 0.6\text{-}0.8 \text{ mS}$ für Filme von 10-20 nm Dicke (ähnlich den Filmen in dieser Arbeit) bestimmt werden.

Tabelle 4.4 | Oberflächenleitfähigkeit σ_s verschiedener Systeme. In der Tabelle wurden zum Vergleich die Leitfähigkeit der Oberfläche trivialer Systeme (reine Halbleiteroberflächen sowie Rekonstruktionen) und die Leitfähigkeit zu TI-Filmen ähnlicher Systeme (Graphen und verschiedene Filme) angegeben. Folgende Kürzel werden benutzt: ARPES-Messung (A), Hall-Messung (H), Mehrpunktmessung (M), Tunnelpotentiometrie-Messung (STP) sowie Volumenleitung (VL).

System	Ref.	σ_s in μS	Methode	Bemerkung
Si(100)-(2×1)	[105]	160 ± 40	M	durch Mehrlagenmodell aus Messdaten ermittelt
Ge(100)-(2×1)		310 ± 60		
Si(111)-(7×7)	[106]	1.3 ± 0.3	STM/M	Methode ähnlich zu STP
	[41]	9 ± 2	M	ermittelt wie bei [105]
Si(111)-(1×1)-Te	[107]	0.26 ± 0.05	M	ermittelt wie bei [105]
Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi	[41]	140 ± 10	M	β -Phase der Bi-Rekonstruktion
Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Ag	[108]	3080 ± 1100	STP	Si ohne Fehlneigung
		270 ± 70	STP	parallel zu 0.5°-Fehlneigung
		> 2000	STP	senkrecht zu 0.5°-Fehlneigung
	[109]	23	M	parallel zu 1.8°-Fehlneigung
Graphen auf SiC(0001)	[110]	5000 ± 700	STP	SiC-Fehlneigung 0.06°
		4400 ± 700	STP	SiC-Fehlneigung 0.5°
		4320 ± 70	M	SiC-Fehlneigung 0.06°
		1460 ± 30	M	SiC-Fehlneigung 0.5°
	[111]	1200	STP	
Graphen auf SiO ₂	[111]	200-410	STP	
Bi(111) auf Si(100)	[112]	1300	M	9 nm Film
Bi(100) auf Si(111)	[113]	1500	M	1-40 nm dicke Filme
(Bi _{0.53} Sb _{0.47}) ₂ Te ₃ auf Si(111)	[114]	320 ± 11	A	9 QL Film mit wenig VL
Bi ₂ Se ₃ auf SiO ₂	[86]	400-800	H/M	ermittelt aus 20-80 nm Filmen
Bi ₂ Te ₃ auf BaF ₂ (111)	[87]	600-800	M	für dünne Filme (10-20 nm)

Um die Werte für die Oberflächenleitfähigkeit σ_s besser einschätzen zu können, wurde die obige Tabelle 4.4 erstellt. σ_s nimmt dabei Werte von 0.26 μS für Si(111)-(1×1)-Te bis zu 5000 μS für eine Monolage Graphen auf SiC an. Die Werte für Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ liegen im mittleren Bereich der in der Tabelle gezeigten Werte und im gleichen Wertebereich wie (Bi_{0.53}Sb_{0.47})₂Te₃ auf Si(111), einem topologischen Isolator mit sehr wenig Volumenleitung. Man erkennt allerdings auch hier, dass sich die Werte innerhalb eines Systems bei unterschiedlichen Messungen deutlich unterscheiden können, so z. B. bei Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Ag-Rekonstruktion und bei Graphen auf SiC.

Die Oberfläche bei Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ hat offensichtlich eine endliche Leitfähigkeit, sodass Elektronen in ihren Zuständen gestreut werden können bzw. müssen. Auch wenn direkte elastische Rückstreuung (um 180°) innerhalb des TSS nicht möglich ist, können Elektronen auch im TSS gestreut werden. Die Wahrscheinlichkeit hierfür ist durch die Projektion des Anfangsspins auf den Endspin bei der Streuung gegeben (entsprechend 0 für entgegengesetzte Spins) [115]. Theoretisch diskutierte Streuprozesse im TSS von 3D TI sind vor allem die Streuung an Störstellen [116], die Elektron-Elektron-Wechselwirkung [117] und die Elektron-Phonon-Streuung [118]. Experimentell wurde die Streuung an

Störstellen z. B. mittels STS-Experimenten auf Bi₂Se₃ [119] und auf Bi₂Te₃ [120] beobachtet. Mittels Hall- und Magnetowiderstands-Messungen wurde die Elektron-Elektron-Wechselwirkung für Bi₂Se₃ [121] und Bi₂Te₃ [122] nachgewiesen. Die Elektron-Phonon-Streuung im TSS tritt in verschiedensten Experimenten in Erscheinung, so konnte sie beispielsweise für Bi₂Se₃ anhand von Widerstandsmessungen [123] und für Bi₂Te₃ [124] durch Streuexperimente beobachtet werden. Insgesamt ist die Phononenstreuung bei Raumtemperatur (300 K) für Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ der dominierende Prozess [115], was auch in den recht niedrigen Debyetemperaturen [125] von etwa 180 K für Bi₂Se₃ und 165 K für Bi₂Te₃ zum Ausdruck kommt. Daher findet im Volumen und im TSS bei Raumtemperatur vornehmlich ein diffusiver Elektronentransport statt.

Dünne Filme aus Bi₂Se₃ bzw. Bi₂Te₃ erhalten durch Se- bzw. Te-Fehlstellen leicht eine n-Dotierung, so dass sich das chemische Potential im TSS in Richtung des Leitungsbandes verschiebt. Hierdurch wird die Zahl der Streukanäle erhöht, da für die Elektronen des TSS eine Vielzahl möglicher Streuzustände in den Bändern vorhanden sind. Demonstriert wurde diese TSS-Band-Streuung durch STS-Experimente sowohl bei Bi₂Se₃ [126] als auch bei Bi₂Te₃. [127]. In diesem Sinne stellen die Werte von σ_s bei Bi₂Se₃ (400-800 μ S) und Bi₂Te₃ (600-800 μ S) Maximalwerte für den Elektronentransport im TSS dar.

Da der TSS Streuung gestattet, können auch morphologische Strukturen auf der Oberfläche wie zum Beispiel Stufenkanten als Streuer wirken. Hierzu haben R. R. Biswas und A. V. Balatsky [76] ein theoretisches Modell für die elastische Streuung an Stufenkanten im TSS von starken 3D TI (wie Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃) aufgestellt, bei dem sie aufgrund der Translationssymmetrie und der Zeitumkehrsymmetrie des Systems das Entstehen und das Abklingverhalten von LDOS-Oszillationen nahe der Stufenkante beschreiben. Das Modell wurde kurz danach durch J. Wang et al. [128] erweitert und zugleich experimentell mittels STS-Messungen an Bi₂Se₃ und Bi₂Te₃ bestätigt. Dieses Modell wird im Folgenden besprochen, wobei auch auf eine spätere Rezension [129] des Modells zurückgegriffen wird. Im Modell wird die elastische Streuung von Wellen im TSS bei tiefen Temperaturen betrachtet. Da es sich um elastische Streuung handelt, spielt sich die Streuung innerhalb einer Fläche konstanter Energie (CEC) ab, d. h., sowohl der Wellenvektor \mathbf{k} der einfallenden Welle als auch der Wellenvektor \mathbf{k}' der ausgehenden Welle müssen innerhalb der gleichen CEC liegen. In Bild 4.14 wurden bereits beispielhaft die CEC für Bi₂Te₃ und Bi₂Se₃ gezeigt (k_x - k_y -Ebene). Die Stufenkante, an der die Welle elastisch gestreut werden soll, liege in k_y -Richtung bzw. y -Richtung, sodass bei der Streuung die k_y -Komponenten der Wellenvektoren erhalten bleiben. In k_x -Richtung bzw. x -Richtung findet durch die gestreuten Wellen Interferenz statt, die sich in Form einer stehenden Welle bzw. LDOS-Oszillation auf der Oberfläche äußert. Die Oszillationswellenlänge für die Überlagerung von einfallender und gestreuter Welle (Streupaar) ergibt sich zu $2\pi/(k_x - k'_x) = 2\pi/\Delta k_x$. Da die Wellenlänge der Oszillation sich je nach Einfallswinkel θ zur Stufenkante unterscheidet, heben die stehenden Wellen vieler Streupaare einander auf.

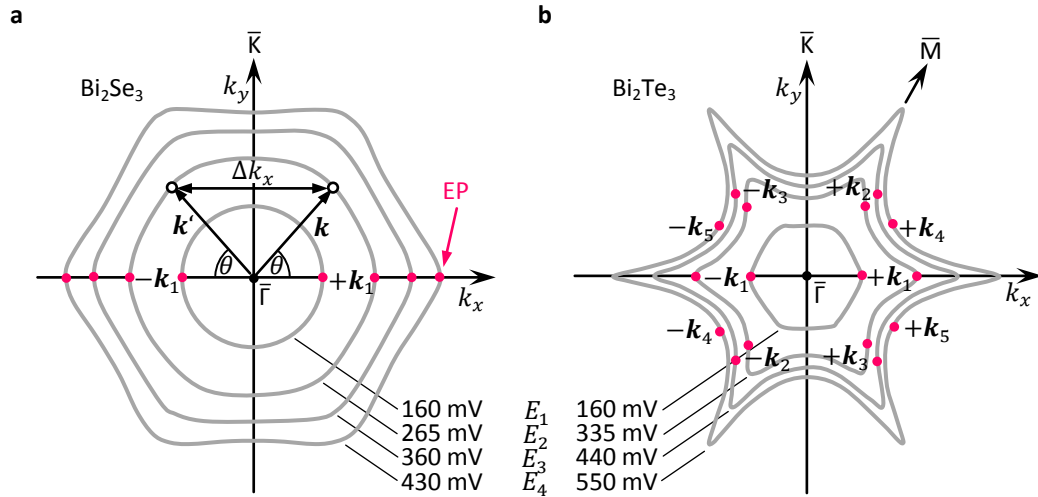


Bild 4.16| Elastische Streuung im topologischen Oberflächenzustand an einer Stufenkante.

Gezeigt sind die Flächen konstanter Energie (CEC) für Bi_2Se_3 (a) und Bi_2Te_3 (b) bei verschiedenen Energien E_1 - E_4 (bezogen auf den Dirac-Punkt), wobei die Stufenkanten immer in Richtung von $\bar{\Gamma}$ nach \bar{K} (k_y -Richtung) verlaufen. In jede CEC sind ihre Extremalpunkte (EP) gegenüber der k_y -Achse eingezeichnet, die vornehmlich zur elastischen Streuung beitragen. In einer CEC (E_2) von Bi_2Se_3 ist beispielhaft ein beliebiges Paar eines einfallenden Vektors \mathbf{k} und gestreuten Vektors \mathbf{k}' gezeigt (θ ist der Einfallswinkel zur Normale der Stufenkante). Darstellung nach [128].

Es gibt elastische Streupaare (k_{x0}, k_{y0}) und (k'_{x0}, k'_{y0}) , deren Oszillationswellenlänge $2\pi/\Delta k_{x0}$ bei einer kleinen Veränderung von k_y nahezu gleich bleibt. Sie führen daher durch ihre konstruktive Interferenz zu LDOS-Oszillationen. Die zugehörigen k -Punkte der Streupaare nennt man Extremalpunkte (EP), da sie die Extremalbedingung $\partial\Delta k_x/\partial k_y|_{k_{y0}}=0$ erfüllen. Um die Extremalpunkte für den TSS in Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 zu bestimmen, wurde in [129] zunächst mittels eines theoretischen Modells und experimentellen Parametern aus der Literatur die CEC des TSS für Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 bei verschiedenen Energien E berechnet und anschließend die EP bestimmt (vgl. Bild 4.16). Bei Bi_2Se_3 sind die CEC über einen weiten Energiebereich recht simpel und zeigen nur ein geringes Warping (Bild 4.16a), sodass sich nur ein EP-Paar bei $-\mathbf{k}$ und $+\mathbf{k}$ befindet. Da direkte Rückstreuung ($\theta = 0$) nicht erlaubt ist, tragen diese EP nur wenig zur Streuung bei und das Abklingen der LDOS-Oszillation an der Stufenkante ergibt sich bis zu einer Energie von 760 meV (beginnendes Warping) zu $x^{-3/2}$ mit x als Abstand zur Stufenkante. Dieses Abklingverhalten ist deutlich schneller als bei einem trivialen 2DEG mit $x^{-1/2}$ [130], bei dem Rückstreuung vollständig erlaubt ist. Bei Bi_2Te_3 ist das Warping schon bei kleinen Energien ausgeprägt und je nach Energie ergeben sich mehr EP (Bild 4.16b), wobei bei E_4 einige EP wegen Volumenzuständen verschwinden. Dabei ist für das EP-Paar $(-\mathbf{k}_1, +\mathbf{k}_1)$ das Abklingverhalten $x^{-3/2}$, für $(\pm\mathbf{k}_2, \mp\mathbf{k}_3)$ $x^{-1/2}$ und für $(\pm\mathbf{k}_4, \mp\mathbf{k}_5)$ x^{-1} . Daher zeigt der TSS in Bi_2Te_3 für Energien < 330 meV ein $x^{-3/2}$ -Verhalten, dann eine Kombination aus $x^{-3/2}$ und $x^{-1/2}$ und schließlich x^{-1} , d. h., durch das Warping wird die Streuung an der Stufenkante gegenüber Bi_2Se_3 erhöht, bleibt jedoch unter dem Abklingverhalten eines trivialen 2DEG ($x^{-1/2}$ -Verhalten).

5 Studien an Bismutselenid

Bi_2Se_3 bildet aufgrund der einfachen Struktur seines Oberflächenzustands und der im Vergleich zu anderen topologischen Isolatoren (TI) großen Bandlücke von etwa 0.3 eV einen idealen Prototyp zur Erforschung der Transporteigenschaften von TI. Daher wurde es im Rahmen der Transportstudien hier als erster TI mittels Mehrpunkt- und STP-Messungen untersucht. Alle Messungen, wenn nicht anders vermerkt, wurden bei Raumtemperatur (RT) durchgeführt.

5.1 Bi-Rekonstruktion auf Si(111)

Die α -Phase der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\text{R}30^\circ$ -Bi-Rekonstruktion bildet das Substrat für alle in dieser Arbeit präparierten Bi_2Se_3 -Filme. Daher wurde im Rahmen der Promotion die Bi-Rekonstruktion hinsichtlich ihrer elektrischen Eigenschaften untersucht. Dies geschah in Zusammenarbeit mit K. Bartsch während seiner Bachelorarbeit »Untersuchung dünner Bi- und Bi_2Te_3 -Schichten« [61].

5.1.1 Präparation

Die α -Phase der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\text{R}30^\circ$ -Bi-Rekonstruktion wurde analog zu [68] präpariert (vgl. Kapitel 4.2.2). Hierfür wurde zunächst auf eine $\text{Si}(111)-(7\times 7)$ -Rekonstruktion (vgl. LEED-Aufnahme in Bild 5.1a) Bismut (Reinheit 99.997 %) mit einer Rate von etwa $(1.20 \pm 0.01) \text{ nm/min}$ für 3 min bei RT auf die Probe gedampft (Kammerdruck in der Präparationskammer ca. $5 \times 10^{-9} \text{ mbar}$). Der entstandene, etwa 3.6 nm dicke Bi-Film zeigte im LEED (siehe Bild 5.1b) sechs hexagonal angeordnete Reflexe, die die gleiche Orientierung wie die (1×1) -Reflexe des Si haben. Der Abstand der Bi-Reflexe zueinander ist gegenüber den Si- (1×1) -Reflexen um den Faktor 0.86 ± 0.02 kleiner, d. h. das Realgitter des Bi-Film ist gegenüber dem (1×1) -Realgitter des Si um den Faktor 1.16 ± 0.02 vergrößert. Die Gitterkonstante des $\text{Si}(111)-(1\times 1)$ -Gitters beträgt 383 pm (vgl. Kapitel 4.1.1), sodass sich eine Gitterkonstante des Bi-Film von $(444 \pm 8) \text{ pm}$ ergibt. Dies entspricht ungefähr dem Wert eines $\text{Bi}(111)$ -Films (Volumenwert 453 pm, siehe Kapitel 4.1.2). Anschließend wurde unter Beobachtung mit dem LEED der Bi-Film auf 450°C hochgeheizt. Ab 220°C wurden die $\sqrt{3}$ -Spots der β -Phase im LEED sichtbar, die gegenüber den Si- (1×1) -Reflexen um den Faktor $1/\sqrt{3}$ verkleinert und um 30° gedreht sind. Bei 310°C wurden die $\sqrt{3}$ -Spots durch Abdampfen von überschüssigem Bi unscharf, wie in Kapitel 4.2.2 beschrieben. Ab 360°C bildete sich die α -Phase der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Bi-Rekonstruktion und die $\sqrt{3}$ -Spots wurden im LEED wieder scharf. Die Probe wurde danach noch bis 450°C geheizt (LEED-Aufnahme der α -Phase nach dem Heizen in Bild 5.1c).

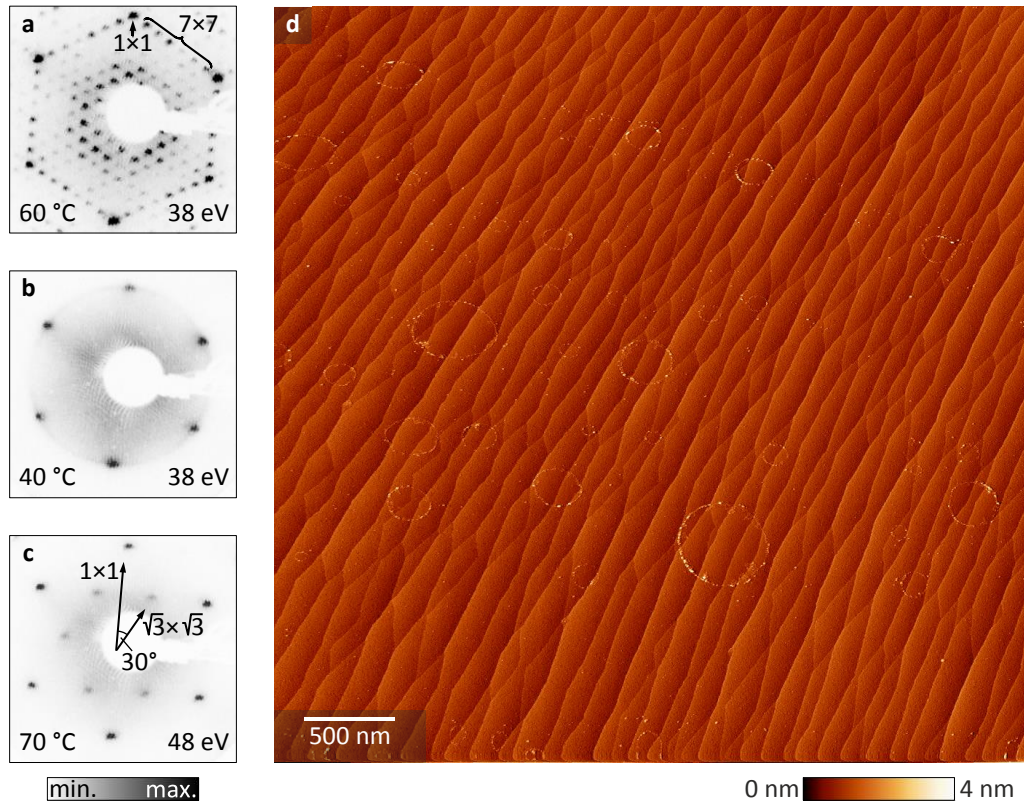


Bild 5.1| Struktur der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{R}30^\circ\text{-Bi}$ -Rekonstruktion. (a-c) LEED-Aufnahmen (mit Proben temperatur und Elektronenenergie) der Präparationsschritte für die Probe: (a) $\text{Si}(111)-(7 \times 7)$ -Rekonstruktion. (b) 3.6 nm dünner, teilweise polykristalliner $\text{Bi}(111)$ -Film. (c) α -Phase der $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion. (d) STM-Aufnahme der α -Phase ($V_t = 0.1\text{ V}$, $I_t = 7\text{ pA}$, $2.5 \times 2.5\text{ }\mu\text{m}^2$).

Bild 5.1d zeigt eine STM-Übersichtsaufnahme der Probenoberfläche mit der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{R}30^\circ\text{-Bi}$ -Rekonstruktion. Die Probe weist Stufenkanten und Terrassen auf, die Folge der 0.5° -Fehlneigung der $\text{Si}(111)$ -Oberfläche sind (vgl. Substrateigenschaften in Kapitel 4.2.1). Auf den Terrassen befindet sich die $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion, die sich jedoch im Rahmen der STM-Messung nicht atomar auflösen ließ, sondern nur im LEED beobachtet werden konnte. Neben der $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion befinden sich auf der Oberfläche zahlreiche Ringe aus Adsorbaten. Zum Teil erscheinen die Adsorbatringe in den STM-Aufnahmen elliptisch. Durch Drehung der STM-Aufnahmen um 90° während der Messung wurde ersichtlich, dass die Ellipsenform Folge einer Bildverzerrung durch Drift ist. Die Ursache für diese Ringe ist nicht bekannt. K. Bartsch konnte im Rahmen seiner Bachelorarbeit [61] die Ringe aus den STM-Aufnahmen vermessen: Er fand heraus, dass die Zahl der Ringe mit kleiner werdendem Radius zunimmt. Außerdem zeigte sich, dass das Volumen der Adsorbatringe annähernd proportional zum Quadrat ihrer Radien ist, d. h. die Adsorbatmenge wächst mit der eingeschlossenen Fläche in den Ringen.

5.1.2 2PP-Messungen

Aufgrund der geringen Bedeckung von $\frac{1}{3}$ ML Bi bei der α -Phase der Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Bi-Rekonstruktion war nicht von vornherein klar, ob sie überhaupt Strom leitet oder aber das Volumen – d. h. der Si-Kristall selbst – den Elektronentransport übernimmt. Daher wurde versucht, den Leitungscharakter der α -Phase mittels einer Zweipunkt(2PP)-Messung zu ermitteln. Für die 2PP-Messung wurde die Probe mit zwei Goldspitzen kontaktiert (siehe SEM-Aufnahmen in Bild 5.2b). In Abhängigkeit ihres Abstands d (ca. 50–1300 μm) wurde der Widerstand R (einige 10 k Ω , vgl. Bild 5.2a) aus der Steigung der linearen I - V -Kennlinien zwischen den beiden Spitzen ermittelt (vgl. Bild 9.4 in Kapitel 9.2.1). Dabei streuen die Messpunkte recht stark. An die Widerstandskurve wurde sowohl das Verhalten einer reinen 2D-Leitung (Gleichung (2.49)) als auch das Verhalten einer reinen 3D-Leitung (Gleichung (2.50)) gefittet. Im ersten Fall entspräche dies einer Leitung entlang der Oberfläche (z. B. in der Bi-Rekonstruktion) und im zweiten Fall einer Leitung durch das Volumen der Probe (Si-Substrat). Der Fit für die 2D-Leitung ergibt $\sigma_{2D,2PP} = (23 \pm 5) \mu\text{S}$ als Leitfähigkeit mit $r_k = (14 \pm 12) \mu\text{m}$ als mittleren Kontaktradius der Spitzen. Der Fit für die 3D-Leitfähigkeit ergibt $\sigma_{3D,2PP} = (2.9 \pm 0.9) \text{ mS/cm}$ mit $r_k = (19 \pm 5) \mu\text{m}$. Da insbesondere Datenpunkte für kleine Abstände nicht gemessen oder ausgewertet werden konnten und die Daten insgesamt recht stark streuen, wird die Zuweisung zu einem 2D- oder 3D-Charakter der Leitfähigkeit erschwert. Jedoch kann man festhalten, dass in der Tendenz die Leitfähigkeit mit zunehmendem Spitzenabstand ebenfalls steigt, was eher dem Verhalten einer 2D-Leitung entspricht. Der durch den 3D-Fit gegebene Wert ist etwas weniger als halb so groß, wie man es für das verwendete Si-Substrat (7.7 mS/cm) erwartet. Jedoch kann man nicht ausschließen, dass sich durch die Präparation die Dotierung des Substrats verändert hat, sodass der Wert noch plausibel erscheint.

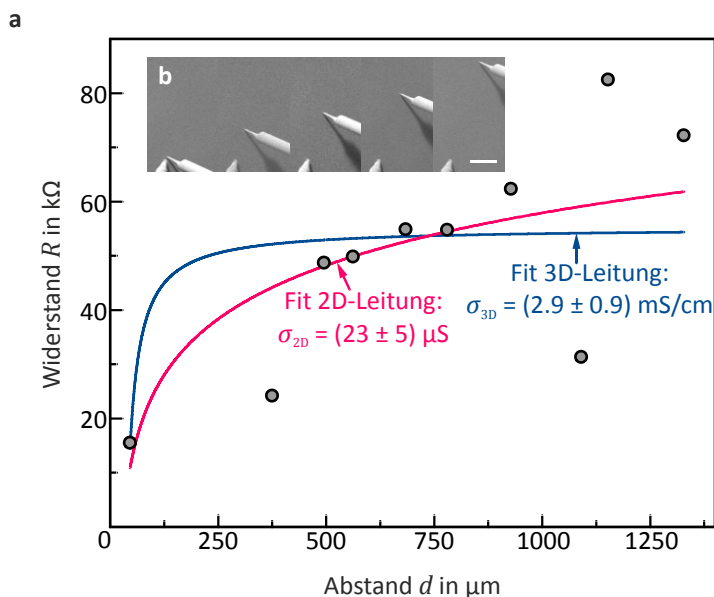


Bild 5.2 | 2PP-Messung der Bi-Rekonstruktion. (a) Auftragung des Widerstand R gegen den Abstand d der Spitzen. Messung bei RT. An die Messpunkte wurde der Fall einer 2D- und einer 3D-Leitung angepasst. (b) 2PP-Messschritte im SEM. Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von 300 μm . Darstellung nach [61].

5.1.3 STP-Messungen

Bild 5.3 zeigt eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung auf der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion. Auf die Probenoberfläche wurden zwei Kontaktspitzen aus Gold im Abstand von $d = (1070 \pm 20) \mu\text{m}$ gesetzt. In der Mitte zwischen beiden Kontaktspitzen wurde die Tunnelspitze aus Wolfram platziert. Leider war der Apex der Tunnelspitze zu kurz und über das SEM nicht ersichtlich. Daher ist die genaue Position des Apex nicht bekannt und wird im Folgenden in der Mitte verortet mit einem Fehler von 40 % (Verhältnis des Tunnelspitzendurchmessers zum Abstand der Kontaktspitzen).

Die STP-Studie ist in Bild 5.4 zusammengefasst. Gezeigt wird die Topographie (Bild 5.4a und Bild 5.4d), das simultan dazu gemessene Potential (Bild 5.4b und Bild 5.4e) sowie Profillinien des Potentials (Bild 5.4c und Bild 5.4f). Bild 5.4a-c und Bild 5.4d-f haben zueinander eine entgegengesetzte Polarität bzw. Flussrichtung der Elektronen. In beiden Topographien (Bild 5.4a und Bild 5.4d) ist die gestufte Si(111)-Oberfläche zu sehen, wobei sich auf den Terrassen die Bi-Rekonstruktion befindet. Ebenfalls sind die zuvor beschriebenen Ringe sowie ein markantes großes Adsorbat (ca. $250 \times 150 \text{ nm}^2$, Höhe ca. 25 nm) zu sehen. Beide Aufnahmen haben zueinander eine Drift, vorrangig in vertikaler Richtung, wie man anhand der Position des großen Adsorbats sieht.

Beide elektrochemischen Potentiale (Bild 5.4b und Bild 5.4e, nachfolgend kurz Potential genannt) zeigen einen nahezu gleichmäßigen Gradienten, der sich mit einem Polaritätswechsel des Stroms umkehrt. In den Potentialaufnahmen kann nur ein markantes Merkmal beobachtet werden, das mit dem großen Adsorbat der jeweiligen Topographie korreliert ist. Andere Objekte wie Stufenkanten oder die deutlich niedrigeren Adsorbatringe haben im Rahmen der gegebenen Messauflösung keinen erkennbaren Einfluss auf das Potential. Am Rand des großen Adsorbats kommt es zu einem Potentialsprung, dessen Vorzeichen abhängig von der Richtung des Potentialgradienten der Umgebung ist. Innerhalb der Adsorbatfläche liegt ein konstanter Gradient vor.

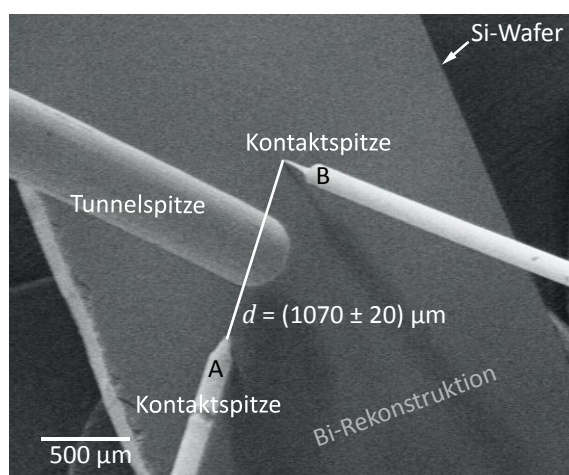


Bild 5.3 | STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie auf der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion für die STP-Messungen. Darstellung ähnlich zu [61].

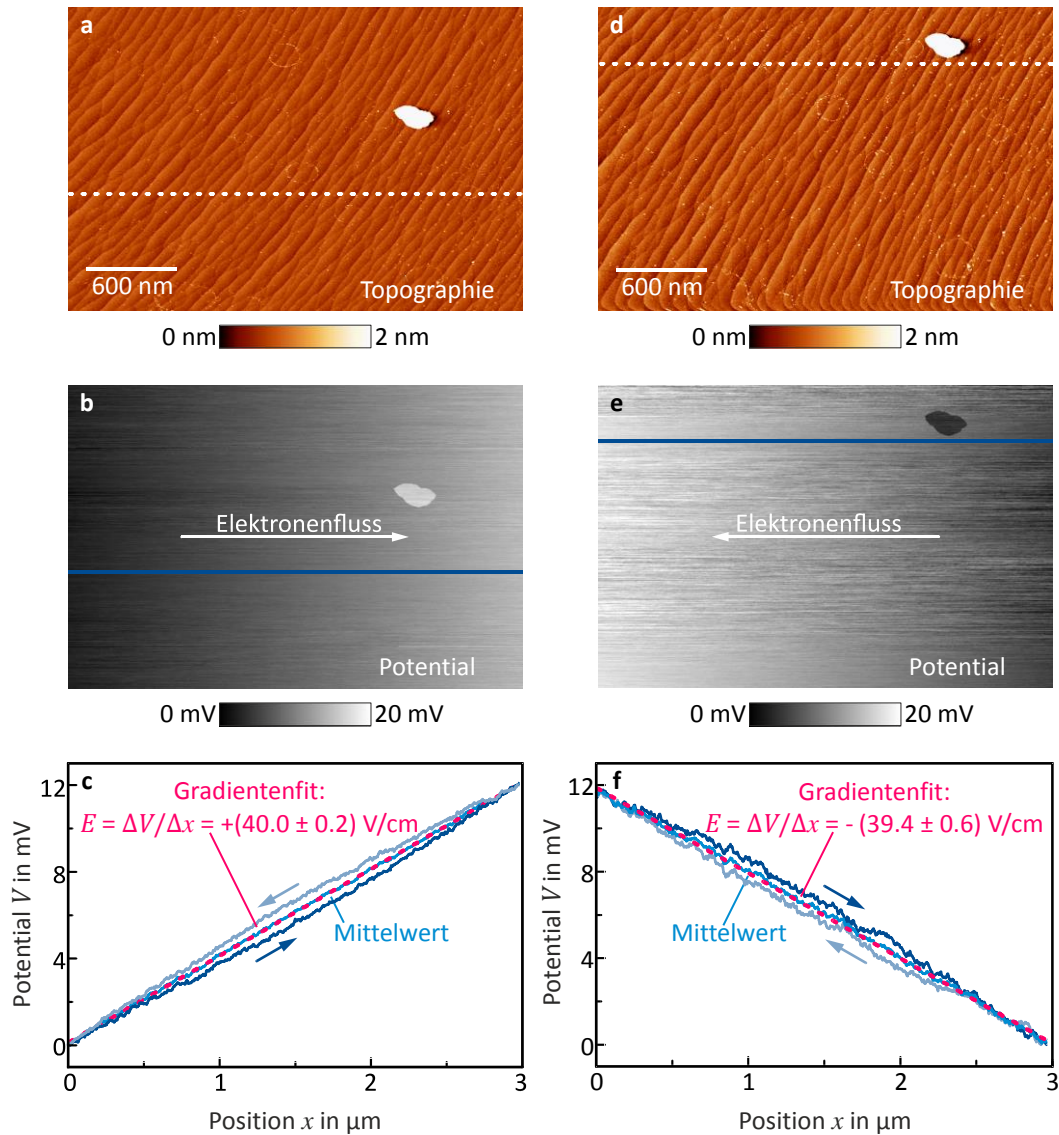


Bild 5.4| STP-Studie der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion. STP-Messung mit $V_{\text{mod}} = 10 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz , $I_t = 7 \text{ pA}$, $3 \times 2 \mu\text{m}^2$, $V_{\text{quer}} = +9.15 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +311 \mu\text{A}$ für **a-c** und $V_{\text{quer}} = -8.44 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -355 \mu\text{A}$ (umgekehrte Polarität) für **d-f**. Alle Messungen bei RT. Für jede Polarität ist jeweils die Topographie (**a** und **d**), das Potential (**b** und **e**) sowie eine Profilinie des Potentials (über 6 Scanzeilen gemittelt, Pfeil \rightarrow) mit ihrer Rückrichtung (ebenfalls über 6 Zeilen gemittelt, Pfeil \leftarrow) sowie der Mittelwert beider Scanprofile gezeigt (**c** und **f**). An den Mittelwert wurde ein linearer Fit zur Bestimmung des Gradienten angelegt.

Bild 5.4c bzw. Bild 5.4f zeigen jeweils Potentialprofile in rauscharmen Bereichen der Potentiale Bild 5.4b und Bild 5.4e. Zusätzlich ist jeweils die Rückrichtung der Scans gezeigt. Für beide Polaritäten (Bild 5.4c und Bild 5.4f) zeigen Vor- und Rückrichtung des Potentials eine leichte Hysterese. Zur Bestimmung des Gradienten bzw. des elektrischen Felds E wurden daher Vor- und Rückrichtung gemittelt. Der Mittelwert zeigt einen annähernd linearen Verlauf, wobei die Werte für beide Polaritäten mit $E = (40.0 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ für Bild 5.4c ($I_{\text{quer}} = +311 \mu\text{A}$) und $E = (39.4 \pm 0.6) \text{ V/cm}$ für Bild 5.4f ($I_{\text{quer}} = -355 \mu\text{A}$) nahezu gleich sind.

5.1.4 Diskussion

Das einzige auffällige Merkmal des Potentials auf der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Bi-Oberfläche ist – neben dem konstanten Gradienten – der Potentialsprung an einem großen Adsorbat. Da der Potentialsprung auf den Polaritätswechsel reagiert, kann man Thermospannung als Ursache ausschließen. Da innerhalb des Adsorbats ebenfalls ein Gradient erkennbar und der Potentialsprung auf den Bereich des Adsorbats begrenzt ist, handelt es sich wahrscheinlich um ein Artefakt durch das Einkopieren eines anderen Probenbereichs (vgl. Kapitel 2.2.4).

Daher ist wahrscheinlich das einzige echte Merkmal des Potentials der vorhandene, nahezu konstante Gradient, der gemäß Kapitel 2.2.2 auf einen diffusen Elektronentransport hinweist. Da aus der 2PP-Messung nicht eindeutig ein 2D- oder 3D-Leitungscharakter ermittelt werden konnte, wird für beide Fälle die Leitfähigkeit mittels des ohmschen Gesetzes $\mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E}$ (Gleichung (2.30)) bestimmt. Hierfür muss die Stromdichte am Ort des Apex der Tunnelspitze abgeschätzt werden. Die Stromdichte im 2D-Fall (Schichtleitung) ist durch Gleichung (2.46) gegeben:

$$\mathbf{j}_{2D} = \frac{I_{\text{quer}}}{2\pi} \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|^2} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_B}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|^2} \right). \quad (5.1)$$

Hierbei sind I_{quer} der Querstrom zwischen den Kontaktspitzen und \mathbf{r} , \mathbf{r}_A und \mathbf{r}_B die Positionen des Tunnelapex und beider Kontaktspitzen (A und B) an der Probenoberfläche. Die dreidimensionale Stromdichte \mathbf{j} ist hierbei direkt über die (unbekannte bzw. schwer definierbare) Schichtdicke t der Rekonstruktion zur 2D-Stromdichte $\mathbf{j}_{2D} = t \cdot \mathbf{j}$ zusammengefasst worden. Analog zu Gleichung (2.46) ergibt sich aus Gleichung (2.45) für die Stromdichte im 3D-Fall (Volumenleitung)

$$\mathbf{j}_{3D} = \frac{I_{\text{quer}}}{2\pi} \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|^3} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_B}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|^3} \right). \quad (5.2)$$

Zur Abschätzung der Stromdichte am Ort der Tunnelspitze werden $\mathbf{r}_A = (0,0,0)$, $\mathbf{r} = (d/2,0,0)$ und $\mathbf{r}_B = (d,0,0)$ gesetzt, d. h. der Tunnelapex soll sich im halben Abstand $d/2$ auf der Verbindungslinie (hier x -Achse) zwischen den Kontaktspitzen befinden. Es ergibt sich für die Stromdichte im 2D- bzw. 3D-Fall

$$\mathbf{j}_{2D} = \frac{2I_{\text{quer}}}{\pi d} \cdot \hat{\mathbf{u}}_x \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{j}_{3D} = \frac{4I_{\text{quer}}}{\pi d^2} \cdot \hat{\mathbf{u}}_x, \quad (5.3)$$

d. h., die Stromdichte zeigt in Richtung $\hat{\mathbf{u}}_x$ (Verbindungslinie zwischen den Kontaktspitzen). Für Bild 5.4a-c z. B. ergibt sich als Betrag der Stromdichte im 2D-Fall $j_{2D} = 2I_{\text{quer}}/\pi d = (1.9 \pm 0.9) \text{ mA/cm}$ und im 3D-Fall $j_{3D} = 4I_{\text{quer}}/(\pi d^2) = (35 \pm 14) \text{ mA/cm}^2$. Gemäß dem Ohmschen Gesetz $j = \sigma \cdot E$ folgt mit $E = (40.0 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ für den 2D-Fall $\sigma_{2D,\text{STP}} = (50 \pm 20) \mu\text{S}$ und für den 3D-Fall $\sigma_{3D,\text{STP}} = (0.9 \pm 0.4) \text{ mS/cm}$. Im Vergleich zur 2PP-Messung weicht der 3D-Fall deutlicher von der Leitfähigkeit des Si-Substrats (7.7 mS/cm) ab. Der Wert aus dem 2D-Fall liegt nah am Wert der 2PP-Messung ($\sigma_{2D,2PP} = (23 \pm 5) \mu\text{S}$). Man

muss sowohl für die 2PP-Messung als auch für die Abschätzung der elektrischen Stromdichte für die STP-Messung beachten, dass die zugrundeliegenden Gleichungen (2.44) und (2.45) eine quasi unendlich ausgedehnte Probe voraussetzen. In laterale Richtung ist dies recht gut erfüllt, jedoch ist die Dicke der Probe mit etwa 400 μm kleiner als der Abstand der Kontaktspitzen zueinander. Daher würde eine 3D-Leitfähigkeit nahezu wie eine 2D-Leitfähigkeit erscheinen. Zudem ist durchaus auch eine Mischform denkbar, bei der ein Teil des Stroms durch die Bi-Rekonstruktion als separater Kanal geleitet wird und ein Teil des Stroms das Substrat durchfließt.

Meiner Kenntnis nach wird in der Literatur nicht über die elektrische Leitfähigkeit der α -Phase berichtet. Jedoch konnte mittels MPP-Messungen die β -Phase untersucht werden [41]. Dabei wurde die β -Phase als reines 2D-System mit einer Leitfähigkeit von $(140 \pm 10) \mu\text{S}$ identifiziert. Man muss hierbei beachten, dass die Bedeckung mit Bi bei der β -Phase mit 1 ML dreimal so groß ist wie bei der α -Phase. In diesem Sinne erscheint es plausibel, dass die α -Phase als 2D-System eine im Vergleich zur β -Phase deutlich niedrigere Leitfähigkeit von etwa 20-50 μS aufweisen könnte, wie die Ergebnisse für den 2D-Fall der 2PP-Messung und der STP-Studie es andeuten. Da jedoch der genaue Leitungscharakter aus den gegebenen Messungen nicht ersichtlich wird, bleibt dies spekulativ.

Dennoch kann man einen wichtigen Schluss ziehen: Die Leitfähigkeit der α -Phase der Bi-Rekonstruktion muss im Vergleich zu anderen 2D-Systemen klein sein. Bereits der hier ermittelte Wert für den Fall einer reinen 2D-Leitung ist mit etwa 30-50 μS im Vergleich zu anderen Systemen klein, wie man anhand von Tabelle 4.4 in Kapitel 4.3.3 erkennen kann. Insbesondere ist die Leitfähigkeit der α -Phase deutlich kleiner als die Oberflächenleitfähigkeit des TSS σ_s von Bi_2Se_3 -Filmen in der topologischen Phase ($\sigma_s = 400\text{-}800 \mu\text{S}$, [86]). Daher wäre ihr Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften eines solchen Bi_2Se_3 -Films von untergeordneter Rolle, falls sie während des Filmwachstums überhaupt erhalten bleibt. Wenn die Bi-Rekonstruktion so schwach leitet, dass partiell oder vollständig der Fall einer 3D-Leitung eintritt, kann man mit den hier vorliegenden Daten die Leitfähigkeit der α -Phase nicht abschätzen. Jedoch zeigen sich Ergebnisse einer mit der Publikation [41] verknüpften Dissertation von M. Blab [131] hierfür nützlich: Blab hat mittels 4PP-Messungen die Leitfähigkeit der β -Phase für Si(111)-Substrate mit verschiedenen Volumenleitfähigkeiten untersucht. Blab fand selbst bei einem Substrat mit einer deutlichen höheren Leitfähigkeit (ca. 50 mS/cm) als dem hier benutzten Si-Substrat ($< 7.7 \text{ mS/cm}$, ca. 15 % im Vergleich zur Leitfähigkeit des Substrats bei Blab) eine reine 2D-Leitfähigkeit bei der β -Phase mit einem Wert von etwa $(160 \pm 70) \mu\text{S}$. Legt man das in dieser Arbeit benutzte Substrat zugrunde, so sollte man einen 2D-Charakter mindestens bis zu einer Oberflächenleitfähigkeit von etwa $15 \% \times 160 \mu\text{S} = 25 \mu\text{S}$ vorliegen haben. Falls also eine Volumenleitung hier partiell oder ganz vorliegt, wird die Leitfähigkeit der α -Phase vermutlich kleiner als 25 μS sein. Wie zuvor für den reinen 2D-Fall erörtert, ist dieser Wert für den Stromtransport in Bi_2Se_3 -Filmen von verhältnismäßig geringer Bedeutung. Dies entspricht auch der Erwartung an ein System mit einer solch kleinen Bedeckung von etwa $\frac{1}{3}$ ML.

5.2 Bi₂Se₃-Film mit einer Schichtdicke von 4.5 QL

Nachfolgend wird eine Studie eines etwa 4.5 QL dicken Bi₂Se₃-Film auf Si(111) gezeigt, die bereits im Rahmen meiner Masterarbeit von mir durchgeführt wurde [15]. Gemäß dem Quantenphasendiagramm von Bi₂Se₃ (Kapitel 4.4.2) liegt bei einer Schichtdicke von 4.5 QL ein Hybrid-TI vor. Da die Untersuchung des nanoskopischen Elektronentransport eines solches System bisher weder in der Literatur beschrieben oder im Rahmen der Promotion vertieft wurde, wird die Studie hier ergänzend gezeigt. Die Daten wurden im Rahmen dieser Arbeit aufbereitet und zusammen mit C. A. Bobisch und A. M. Bernhart in der Fachzeitschrift *Applied Surface Science* [132] veröffentlicht.

5.2.1 Präparation

Die Präparation wurde wie bei Zhang et al. [69] durchgeführt (vgl. auch Kapitel 4.2): Analog zu Kapitel 5.1.1 wurde auf eine Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion (vgl. Bild 5.5a, gleiches, gestuftes Si-Substrat wie in Kapitel 5.1.1) die α -Phase der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion (vgl. Bild 5.5b) hergestellt. Auf die α -Phase wurde gleichzeitig Se (Reinheit 99.999 %, Rate (320 ± 10) pm/min) und Bi (Reinheit 99.997 %, Rate (210 ± 10) pm/min) bei RT für 10 min gemeinsam aufgedampft (Kammerdruck ca. 5×10^{-9} mbar). Dies entspricht gemäß Gleichung (3.5) einem Teilchenverhältnis Se:Bi von $(2.0 \pm 0.2):1$, d. h., gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis (1.5:1) lag ein Überschuss an Se vor. Mit Gleichung (3.6) ergibt sich eine Schichtdicke des gewachsenen Bi₂Se₃-Films von (4.3 ± 0.2) nm. Dies entspricht ca. (4.5 ± 0.2) QL mit 1 QL = 952 pm nach Tabelle 4.2 ($\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c). Diese Schichtdicke liegt gemäß dem Quantenphasendiagramm von Bi₂Se₃ (Kapitel 4.4.2) unter dem kritischen Wert von 6 QL für die TI-Phase, sodass sich die elektronische Struktur des Bi₂Se₃-Films in einer hybridisierten topologischen Phase befindet (Hybrid-TI).

Der Film wurde analog zu [69] auf 120 °C für 5 min getempert, um eine glatte und flache Filmbeschaffenheit zu erreichen. In Bild 5.5c ist ein LEED-Bild des Bi₂Se₃-Films zu sehen, das ein scharfes hexagonales Beugungsmuster zeigt. Dies impliziert einen kristallinen und geschlossenen Film, wobei sich analog zu Kapitel 5.1.1 mittels der Si-(1×1)-Reflexe eine Gitterkonstante in Bild 5.5a von etwa (417 ± 9) pm ergibt (Volumenwert 414 pm, siehe Tabelle 4.2). Auch unter dem STM (Bild 5.5d) erscheint der Film flach, glatt und kristallin. Die Probenoberfläche zeigt die Stufung des zugrunde liegenden Si-Substrats (Terrassenbreite ca. 50-150 nm). Die Si-Terrassen werden vom Bi₂Se₃-Film bedeckt, dessen obere Schicht ein mäanderartiges Muster bildet (siehe auch Bild 5.5e). Die Bi₂Se₃-Schichten haben eine Höhe von etwa (950 ± 50) pm (siehe Bild 5.5f), die der Dicke von QL in Bi₂Se₃ (952 pm) entspricht. Daneben finden sich Stufenhöhen um (300 ± 50) pm auf der Filmoberfläche (z. B. in Bild 5.5e), die der Höhe von Si-Einzelstufen entsprechen (313 pm, vgl. Kapitel 4.1.1).

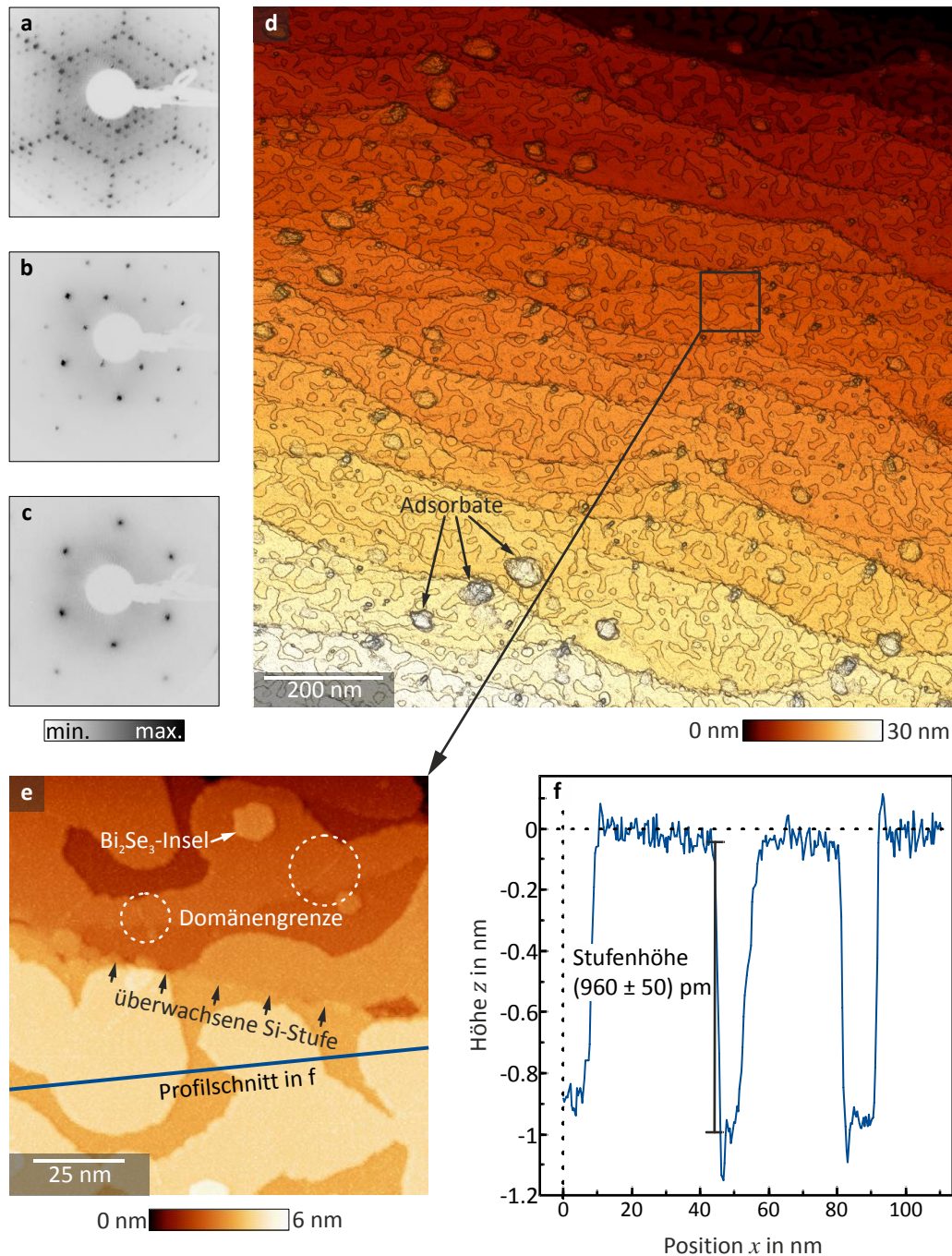


Bild 5.5| Struktur des Bi₂Se₃-Films mit 4.5 QL Dicke. (a-c) LEED-Aufnahmen der Präparationsschritte für die Probe (jeweils bei RT und einer Elektronenenergie von 65 eV aufgenommen): (a) Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion. (b) α-Phase der √3Bi-Rekonstruktion. (c) 4.5 QL Bi₂Se₃-Film. (d-f) STM-Studie des Bi₂Se₃-Films ($V_t = 1$ V, $I_t = 5$ pA, Aufnahmen bei RT): (d) Übersichtsaufnahme ($1.1 \times 1.1 \mu\text{m}^2$, Aufnahme mit Beschattung). (e) Aufnahme mit $110 \times 110 \text{ nm}^2$. (f) Profil aus e.

Betrachtet man die mäandrierende Filmoberfläche genauer, sind Adsorbate (vgl. Bild 5.5d) – vermutlich überschüssiges Selen aus dem Aufdampfprozess – sowie Bi₂Se₃-Inseln und Domänengrenzen zu sehen (Bild 5.5e). Die Domänengrenzen zeigen sich als dünne Linien in der STM-Aufnahme mit einer Breite von etwa $(150 \pm 50) \text{ pm}$ und einer Höhe von $(50 \pm 20) \text{ pm}$.

5.2.2 2PP-Messung

Der Leitungscharakter des Bi_2Se_3 -Films wurde mittels einer 2PP-Messung untersucht (siehe Bild 5.6). Das verwendete Si-Substrat ist identisch zu Kapitel 5.1 und hat eine recht niedrige Leitfähigkeit von 7.7 mS/cm , sodass Proben mit einem Filmleitwert von schätzungsweise $25 \mu\text{S}$ einen Schichtleitungscharakter zeigen sollten (siehe Kapitel 5.1.4). Da der hier präparierte Film durch Se-Fehlstellen während des Wachstums vermutlich im Volumen stärker dotiert ist, kann man einen Leitwert $\gg 25 \mu\text{S}$ erwarten. Daher werden hier und in den nachfolgenden Kapiteln für gewachsene Filme nur Schichtleitwerte angegeben. Für die 2PP-Messung wurden zwei Goldspitzen benutzt (siehe SEM-Aufnahmen in Bild 5.6b). In Abhängigkeit ihres Abstands d (ca. $50\text{--}500 \mu\text{m}$) wurde der Widerstand R (einige $\text{k}\Omega$, siehe Bild 5.6a) aus der Steigung der linearen I - V -Kennlinien zwischen den beiden Spitzen ermittelt (vgl. Bild 9.5 in Kapitel 9.2.1). Der Widerstand konnte nur für wenige Messpunkte ermittelt werden, die jedoch wenig streuen. Der an diese Messpunkte angepasste Fit (Gleichung (2.49)) für die Schichtleitung gibt den Verlauf der Messpunkte sehr gut wieder. Dabei wurde ein Schichtleitwert von $G_{2\text{PP}} = (280 \pm 20) \mu\text{S}$ mit einem mittleren Kontaktradius von $r_k = (0.21 \pm 0.04) \mu\text{m}$ ermittelt. Um den Einfluss der Kontaktwiderstände abschätzen zu können, wurde zu Gleichung (2.49) ein Kontaktwiderstand R_k addiert und als Fit an die Messwerte angepasst. Dabei zeigte sich, dass sich die errechneten Schichtleitwerte bei Kontaktwiderständen von bis zu $R_k < 1 \text{ k}\Omega$ praktisch nicht veränderten, wobei r_k auf $(0.5 \pm 0.1) \mu\text{m}$ bei $R_k = 1 \text{ k}\Omega$ wächst. Damit verkleinert R_k beim Fitten von Gleichung (2.49) vor allem r_k . Man kann zwar die Kontaktwiderstände nicht direkt bestimmen, jedoch liegen sie vermutlich in der Größenordnung von maximal 200Ω . Daher kann man annehmen, dass die Kontaktwiderstände hier das Ergebnis des Fits für die Schichtleitung praktisch nicht beeinflussen (vgl. hierzu auch [132]).

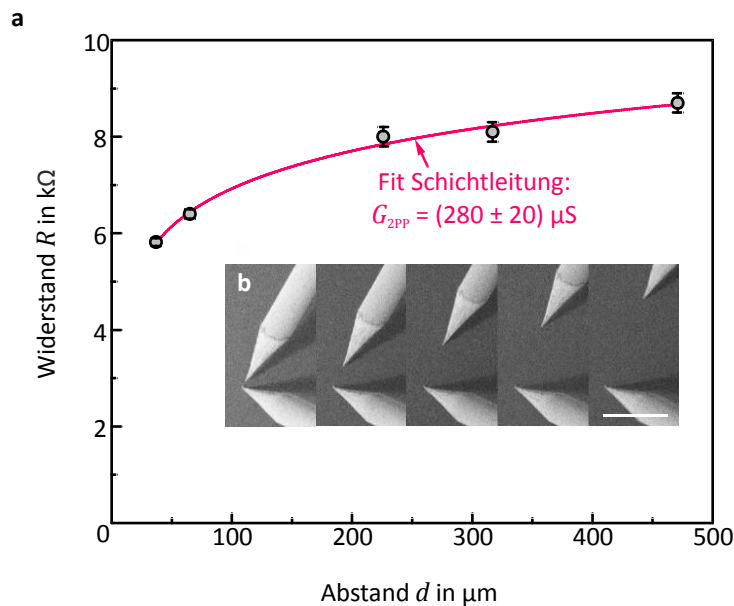


Bild 5.6 | 2PP-Messung auf dem 4.5 QL Bi_2Se_3 -Film.

(a) Auftragung des Widerstand R gegen den Abstand d der Spitzen. Messung bei RT. An die Messpunkte wurde der Fall einer Schichtleitung angefitet. (b) 2PP-Messschritte im SEM. Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von $200 \mu\text{m}$. Darstellung ähnlich zu [132].

5.2.3 STP-Messung

In Bild 5.7 ist eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung gezeigt. Die Tunnelspitze befindet sich nicht in der Mitte der Verbindungslinie der beiden Kontaktspitzen (Abstand ca. 1670 μm), sondern näher an der rechten Kontaktspitze (Abstand zur Kontaktspitze $b = (260 \pm 20) \mu\text{m}$). Während der STP-Studie hatte die Tunnelspitze verschiedene Positionen entlang der gestrichelten Linie eingenommen. Um der Tunnelspitze volle Bewegungsfreiheit entlang der gestrichelten Linie zu ermöglichen, ist der Abstand der linken Kontaktspitze größer gewählt (Abstand zur Tunnelspitze $a = (1410 \pm 20) \mu\text{m}$).

Bild 5.8 zeigt eine STP-Aufnahme des 4.5 QL Bi₂Se₃-Films am Schnittpunkt der Verbindungslinie zwischen beiden Kontaktspitze mit der gestrichelten Linie in Bild 5.7. Die Scanrichtung ist so gewählt, dass sie parallel zur Verbindungslinie bzw. dem Stromtransport zwischen den Kontaktspitzen steht. Zudem ist die Scanrichtung senkrecht zur Stufung des Si-Substrats. Im vorliegenden Bildausschnitt zeigt die Probentopographie (Bild 5.7a) eine gleichmäßige Terrassierung mit einer Terrassenbreite von 50 nm. Die Terrassenhöhe beträgt dabei ungefähr 300 pm, sodass es sich um die Si-Einzelstufen des Substrates handelt. Auf der mäanderartigen Struktur des Bi₂Se₃-Films befinden sich neben kleinen Bi₂Se₃-Inseln einzelne Adsorbate sowie Ansammlungen von Adsorbaten auf der Oberfläche (z. B. in Bild 5.8a links zu sehen).

Die zugehörige Aufnahme des elektrochemischen Potentials (Bild 5.7b, im Folgenden kurz Potential genannt) zeigt vornehmlich einen konstanten Gradienten in Richtung des Elektronenflusses. Dem Gradienten sind zusätzliche Signale (ca. einige mV hoch) an der Position von Bi₂Se₃-Stufenkanten und kleineren Bi₂Se₃-Inseln und Adsorbaten überlagert, wie man es anhand der Ausschnitte in Bild 5.8a und Bild 5.7b erkennen kann. Bild 5.8c zeigt die Rückrichtung zu Bild 5.8b. Sowohl die Richtung des Gradienten als auch die zusätzlichen Signale an den Stufenkanten und kleinen Inseln bleiben erhalten (siehe insbesondere den Ausschnitt in Bild 5.7c), d. h., diese Signale sind kein Artefakt der STM-Regelung.

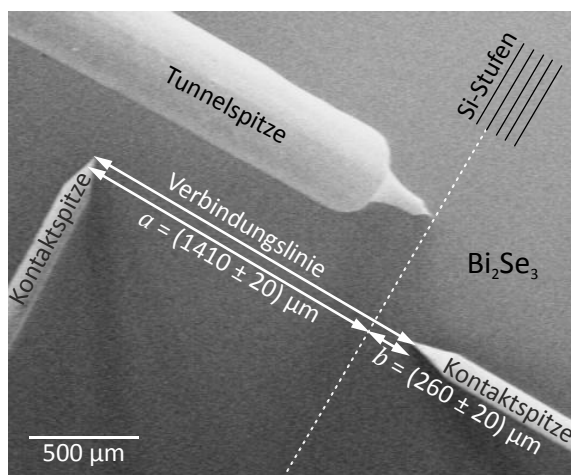


Bild 5.7 | STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung auf dem 4.5 QL Bi₂Se₃-Film. Bild nach [132].

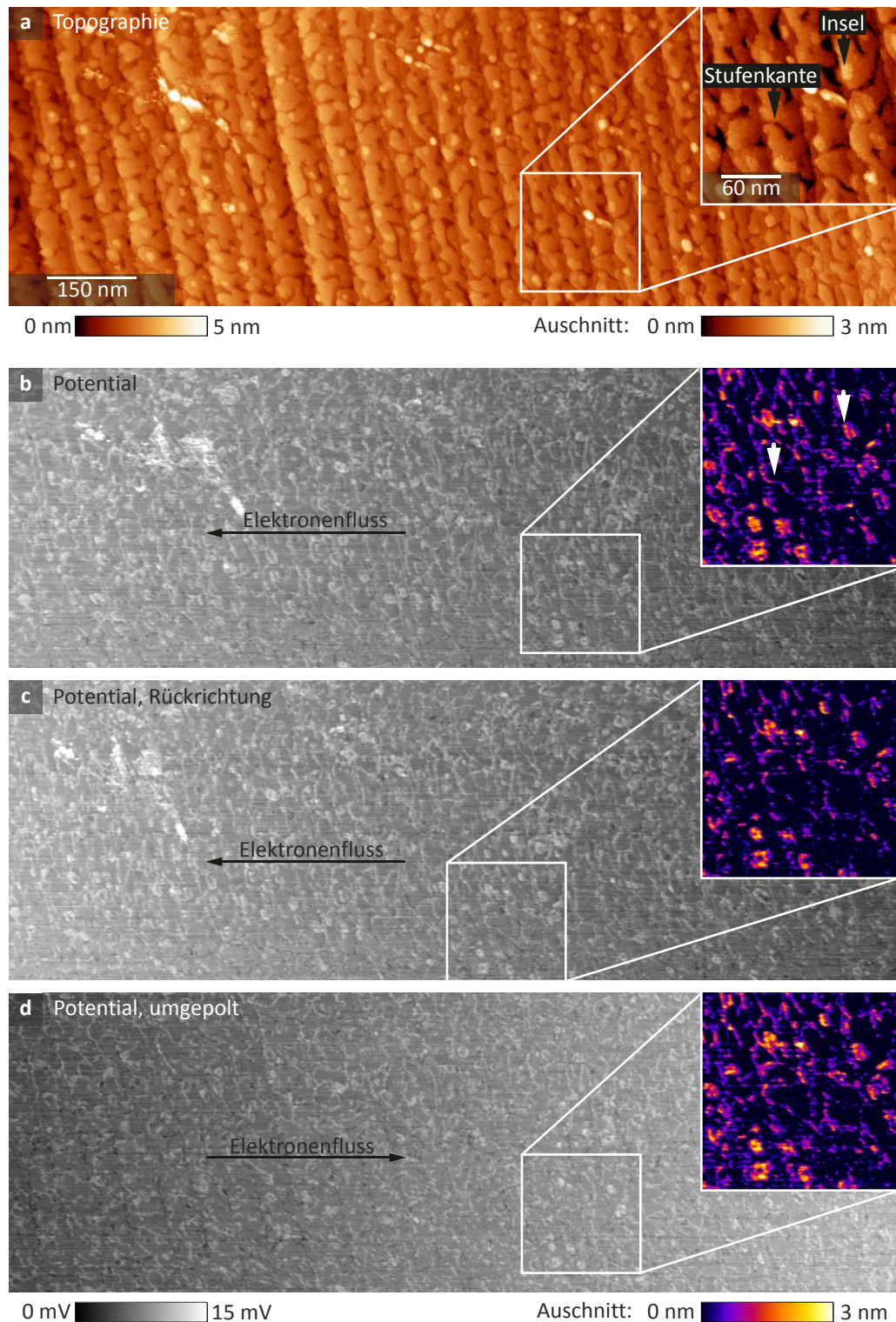


Bild 5.8| STP-Untersuchung des 4.5 QL Bi_2Se_3 -Film. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 1 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz, $I_t = 10 \text{ pA}$ und $1.5 \times 0.5 \mu\text{m}^2$ am Schnittpunkt der Verbindungslinie der Kontaktspitzen und der gestrichelten Linie in Bild 5.7. (a-c) STP-Messung mit $V_{\text{quer}} = -9.60 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -605 \mu\text{A}$. Gezeigt werden die Topographie (a), das Potential (b) sowie die Rückrichtung des Potentials (c). (d) Potential aus einer weiteren STP-Messung an der gleichen Stelle mit umgekehrter Polarität ($V_{\text{quer}} = +9.62 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +645 \mu\text{A}$). Zusätzlich ist zur besseren Sicht ein Ausschnitt aus den Aufnahmen an der gleichen Stelle gezeigt ($200 \times 200 \text{ nm}^2$). Darstellung ähnlich zu [132].

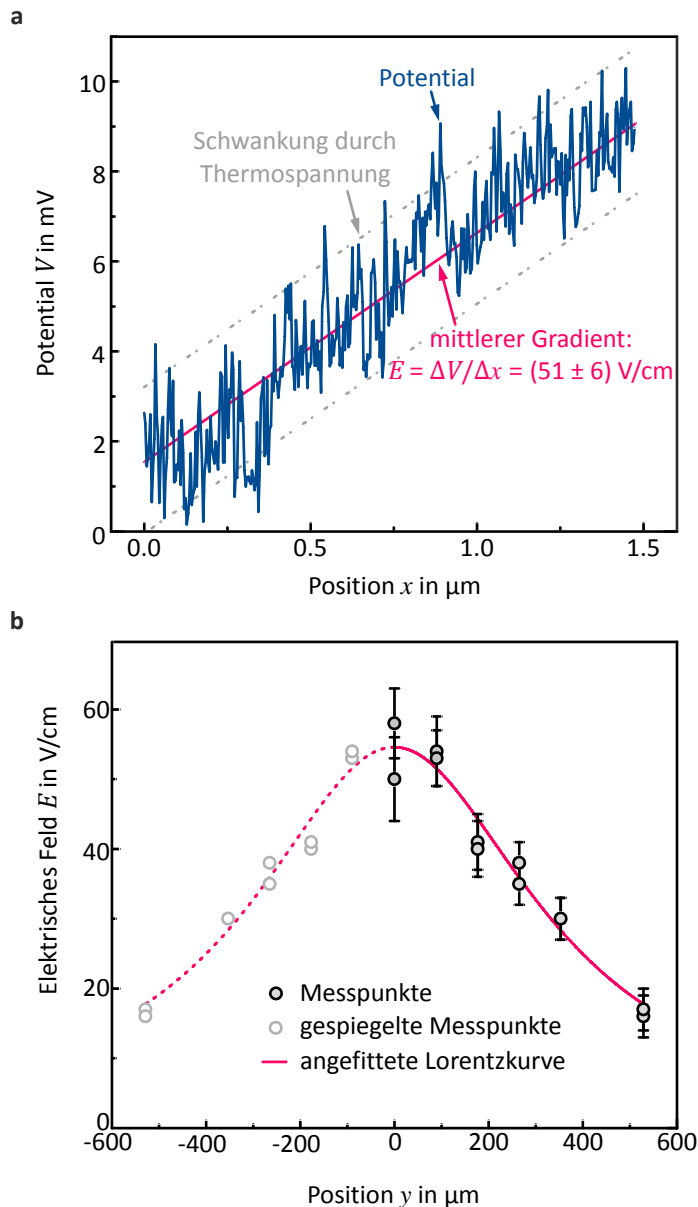


Bild 5.9| Gradient des Potentials und seine Verteilung auf der Filmoberfläche. (a) Profil durch das Potential in Richtung des Elektronenflusses in Bild 5.8d. (b) Verteilung des elektrischen Feldes E entlang der gestrichelten Linie (hier y-Achse) in Bild 5.7. Messungen bei RT. Darstellung aus [132].

Um zu prüfen, ob die Signale durch Thermospannung hervorgerufen wurden, wurde die Polarität der Querspannung und damit die Elektronenflussrichtung gewechselt (Bild 5.8d, vgl. Kapitel 2.2.3). Dabei wechselte der Gradient erwartungsgemäß seine Richtung, während die Signale ihre Polarität beibehielten. Da die Signale nicht auf den Wechsel der Elektronflussrichtung und damit auf das Transportfeld reagieren, handelt es sich wahrscheinlich um Thermospannungssignale an den Stufenkanten und kleinen Inseln. Ein Teil der Signale an den Adsorbaten ist in Bild 5.8d gegenüber Bild 5.8b nicht mehr zu sehen, da die Tunnelspitze während des Rasterns diese Adsorbate aus dem Scanbereich entfernt hat.

Bild 5.9a zeigt eine Profillinie durch die Potentialaufnahme in Bild 5.8b. Der mittlere Gradient ist dabei etwa $(51 \pm 6) \text{ V/cm}$, wobei durch die Thermospannungsbereiche eine große Variation des Potentials zum mittleren Gradienten entsteht. Im Potential kann man neben dem Gradienten keine weiteren Merkma-

le ausfindig machen, die durch den Elektronentransport bedingt sind, da die Thermospannungssignale zu einer sehr starken Variation des Potentials führt, sodass entsprechende Merkmale verdeckt sein könnten.

Die lokale Stromdichte auf der Probe wurde in der zugehörigen Veröffentlichung [132] bestimmt, indem an verschiedenen Positionen auf der gestrichelten Linie in Bild 5.7 (im Folgenden als y -Achse bezeichnet) mittels STP-Messung aus dem mittleren Gradient das elektrische Feld E berechnet wurde. Bild 5.9b zeigt die Verteilung des elektrischen Felds $E(y)$ entlang der gestrichelten Linie in Bild 5.7, wobei y der Abstand zur Verbindungslinie zwischen den Kontaktspitzen ist. In den STP-Aufnahmen verläuft die schnelle Scanrichtung parallel zur Verbindungslinie zwischen den Kontaktspitzen und die Aufnahmen wurden nur für positive Abstände durchgeführt. Zur besseren Übersicht wurden die entsprechenden Messpunkte zu negativen Abständen gespiegelt. Über das Ohmsche Gesetz $j_{2D}(y) = G \cdot E(y)$ ist die Verteilung des elektrischen Feldes $E(y)$ mit der Verteilung der 2D-Stromdichte $j_{2D}(y)$ verbunden. Eine Lorentzfunktion gibt den Verlauf von $E(y)$ gut wieder, wobei die Halbwertsbreite $(740 \pm 80) \mu\text{m} = 2c$ beträgt. Durch das Ohmsche Gesetz sollte daher auch die Verteilung der lokalen Stromdichte der gleichen Lorentzverteilung folgen. Das Integral über $j_{2D}(y)$ entspricht dem fließenden Querstrom I_{quer} :

$$I_{\text{quer}} = \int_{-\infty}^{+\infty} j_{2D}(y) dy = j_{2D}(0) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{c}\right)^2} dy = j_{2D}(0) \cdot \pi c. \quad (5.4)$$

Der Querstrom betrug etwa $(550 \pm 50) \text{ mA}$ während der Messung von $E(y)$, sodass sich eine 2D-Stromdichte von $j_{2D}(0) = I_{\text{quer}}/(\pi c) = (4.7 \pm 0.9) \text{ mA/cm}$ am Ursprung (auf der Verbindungslinie) ergibt. Damit folgt für den Schichtleitwert $G_{\text{STP}} = (90 \pm 30) \mu\text{S}$. Ergänzend hierzu wird nachfolgend noch die Stromdichteabschätzung mittels Gleichung (2.51) für Bild 5.8b durchgeführt. Nimmt man gemäß Bild 5.7 die Position der linken Kontaktspitze zu $\mathbf{r}_A = (0,0,0)$, die Position der rechten Kontaktspitze zu $\mathbf{r}_B = (a+b, 0,0)$ und die Position der Tunnelspitze zu $\mathbf{r} = (a, 0,0)$ an, ergibt sich aus Gleichung (5.1) als 2D-Stromdichte

$$\mathbf{j}_{2D} = \frac{I_{\text{quer}}}{2\pi} \cdot \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) \cdot \hat{\mathbf{u}}_x, \quad (5.5)$$

die entlang der Verbindungsachse (x -Achse) zwischen den Kontaktspitzen zeigt. Mit $a = (1410 \pm 20) \mu\text{m}$ und $b = (260 \pm 20) \mu\text{m}$ folgt als Betrag der Stromdichte $j_{2D} = I_{\text{quer}}/(2\pi) \cdot (1/a + 1/b) = (4.4 \pm 0.4) \text{ mA/cm}$ in Bild 5.8b. Im Rahmen des Fehlers stimmt das Ergebnis mit der Abschätzung aus der Verteilung des elektrischen Felds in Bild 5.9b aus der vorangegangenen Publikation [132] überein. Mit dem Gradienten in Bild 5.9a von $E = (51 \pm 6) \text{ V/cm}$ ergibt sich dabei ein Schichtleitwert des Bi_2Se_3 -Films von $G = j_{2D}/E = (90 \pm 20) \mu\text{S}$.

5.2.4 Diskussion

Die eher globale 2PP-Messung (μm -Skala) ergibt für den 4.5 QL Bi₂Se₃-Film einen Schichtleitwert von $G_{2PP} = (280 \pm 20) \mu\text{S}$. Die Größenordnung von G_{2PP} stimmt mit den Messungen anderer Gruppen überein, so z. B. $330 \mu\text{S}$ für einen 5 QL Bi₂Se₃-Film auf Saphir in (0001)-Orientierung, entnommen aus [133]. Die lokale STP-Messung (nm-Skala) weist einen Schichtleitwert von $G_{STP} = (90 \pm 30) \mu\text{S}$ aus, der etwa um den Faktor 3 kleiner ist als bei der 2PP-Messung. Da allerdings der Bi₂Se₃-Film mit wenigen QL äußerst dünn ist, kann eine lokale Inhomogenität z. B. der Schichtdicke oder der Konzentration an Se-Fehlstellen lateral im Bi₂Se₃-Film vorliegen. Da die STP-Messung eine sehr lokale Methode ist, wird sie durch solche lokalen Abweichungen entsprechend beeinflusst. Im Vergleich zu dem hier vorliegenden 4.5 QL dicken Film, der gemäß Kapitel 4.4.2 einen Hybrid-TI bildet, zeigen dickere Filme in der topologischen Phase deutlich höhere Leitwerte (z. B. 1.4 mS für einen 10 QL dicken Film auf Saphir in (0001)-Orientierung, entnommen aus [133]). Dort ist neben dem dickeren Volumenmaterial der topologische Oberflächenzustand (TSS) vollständig ausgebildet, der z. B. auf der Vakuumseite von Bi₂Se₃ eine Leitfähigkeit von etwa $\sigma_s = 400\text{--}800 \mu\text{S}$ hat (vgl. Tabelle 4.4). Die Leitfähigkeit des TSS ist schon deutlich größer als der hier bestimmte Wertebereich für den 4.5 QL Bi₂Se₃-Film.

In den Potentialaufnahmen der STP-Messungen fanden sich im Potential Thermospannungssignale, die den durch den Elektronentransport hervorgerufenen Gradienten überdeckten. Solche Thermospannungssignale können im Tunnelkontakt auftreten, wenn die Temperatur von Spitze und Probe unterschiedlich ist. Neben kaum erfassbaren inhärenten Prozessen der Messanlage, die zu einer systematischen Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe führen können, kann der bei der STP-Messung in die Probe geleitete Querstrom zu einer Erwärmung der Probe gegenüber der Spitze führen. Es wird daher eine grobe Abschätzung für die untere Grenze der Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe infolge des Stromtransports in der Probe versucht. In Bild 5.8b lag eine Querspannung von $V_{\text{quer}} = 9.6 \text{ V}$ und ein Querstrom von $I_{\text{quer}} = 600 \mu\text{A}$ vor, sodass eine elektrische Leistung von $P = V_{\text{quer}} \cdot I_{\text{quer}} = 5.8 \text{ mW}$ während der Messung in die Probe eingebracht wurde. Im Folgenden wird angenommen, dass die gesamte elektrische Leistung in Wärme umgewandelt wird. Der Abstand der Kontaktspitzen, die den Querstrom tragen, beträgt etwa 1.6 mm und führt zu einer großen, geheizten Fläche zwischen den Spitzen, verglichen mit der recht dünnen Dicke der Probe von etwa 0.4 mm . Da die Experimente unter UHV-Bedingungen gemacht werden und die Temperaturdifferenz zwischen Probe und Umgebung klein sein wird ($< 5^\circ\text{C}$), sind thermische Konvektion und Wärmestrahlung für den Wärmeabtransport vernachlässigbar. Daher wird der Wärmetransport wohl vorrangig durch Wärmeleitung getragen. Dabei ist der Wärmeleitungskoeffizient κ bei Raumtemperatur für Si mit $1.48 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63] gegenüber Bi₂Se₃ mit $0.025 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [125] um den Faktor 60 größer, sodass vor allem das Si-Substrat den Wärmetransport übernehmen sollte. Die Probe hat die Maße $12 \times 4 \times 0.4 \text{ mm}^3$.

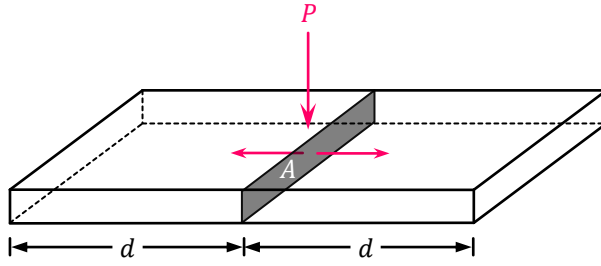


Bild 5.10| Geometrie für die Abschätzung der Temperaturdifferenz bei der STP. Die Leistung P werde in der Probe entlang der Fläche A gleichmäßig in Wärme umgewandelt. Die Wärme fließe durch die Probe zu den Stirnflächen im Abstand d ab.

Zur Vereinfachung werde die gesamte elektrische Leistung in die Querschnittsfläche $A = 4 \times 0.4 \text{ mm}^2$ in der Probenmitte eingebracht und fließe durch das Substrat bis zu den Stirnflächen der Probe am Probenhalter (Transportstrecke $d = 6 \text{ mm}$, siehe auch Bild 5.10). Wenn der Wärmefluss quasistatisch ist, ergibt sich gemäß dem Fouriengesetz zwischen der Probe und der Umgebung bzw. der Spitze als Temperaturdifferenz

$$\Delta T = \frac{P}{2} \cdot \frac{d}{A \cdot \kappa}. \quad (5.6)$$

Eingesetzt in Gleichung (5.6) ergibt sich $\Delta T = 0.07 \text{ °C}$. Eine solch kleine Temperaturdifferenz kann bereits ausreichen, um innerhalb des Tunnelkontakts signifikante Thermospannungseffekte zu erzeugen [134]. Dennoch ist dieser Wert nur als untere Grenze zu sehen, da im realen Experiment die elektrische Leistung vornehmlich in der Fläche zwischen den Kontaktspitzen dissipiert wird und der Film eine deutlich schlechtere Wärmeleitfähigkeit als das Si hat, sodass die Temperatur an der Bi_2Se_3 -Oberfläche höher als 0.07 °C sein sollte.

Gemäß Gleichung (2.41) wird die Höhe der Thermospannung V_{th} neben der Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe auch von der Variation der normierten Ableitung der Proben-LDOS $D_p(E)$ am mittleren chemischen Potential μ zwischen Spitze und Probe bestimmt: $V_{\text{th}} \sim D'_p(\mu)/D_p(\mu)$. Da bei dem vorliegenden Bi_2Se_3 -Film die Thermospannung in der Nähe von Stufenkanten und kleinen Inseln auftrat, müssen diese eine entsprechend veränderte LDOS gegenüber den Flächen aufweisen. Man hat ähnliche Thermospannungseffekte an Stufenkanten z. B. auf Metalloberfläche wie Cu(111) [135] und Au(111) [136] beobachtet, wobei man bei [136] auch einen Unterschied der Thermospannung in Abhängigkeit der Stufenorientierung auf der Oberfläche gefunden hat. Die genaue Ursache für die veränderte LDOS an den Stufenkanten ist unbekannt. Es wird unter Anderem diskutiert, dass an den Stufenanten volumenartige Zustände vorlägen, die zu einer veränderten LDOS führen könnten [136]. Die Ursache der Thermospannungssignale an Stufenkanten und kleinen Inseln beim 4.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film bleibt daher offen.

Das Hauptmerkmal für das Potential des 4.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film ist der konstante Gradient, der eindeutig auf den Elektronentransport zurückzuführen ist. Der Gradient deutet dabei auf einen diffusiven, durch Phononenstreuung dominierten Elektronentransport hin (vgl. Kapitel 2.2.2), wie man ihn für Bi_2Se_3 auch

erwartet (vgl. Kapitel 4.4.3). Andere transportbedingte Effekte wie z. B. Spannungsabfälle an Stufenkanten konnten nicht mit der vorhandenen Potentialauflösung beobachtet werden. Dies ist bemerkenswert, da aus der Literatur hervorgeht, dass Stufenkanten in Bi₂Se₃ auch als Streuer für die Ladungsträger im Transportfeld wirken könnten. Für dünne Bi₂Se₃-Filme in der Hybrid-TI-Phase wurden durch Zhang et al. [137] LDOS-Oszillationen gefunden, die durch Streuung von Leitungselektronen an den Stufenkanten verursacht werden. Dabei zeigt die LDOS-Oszillation ein Abklingverhalten von $x^{-3/2}$ mit x als Abstand zur Stufenkante. Dieses Abklingverhalten entspricht einem rein topologischen System (siehe hierzu auch Kapitel 4.4.3) und ist schneller als bei einem trivialen 2D-Elektronengas mit $x^{-1/2}$. Man kann allerdings nicht ausschließen, dass unter den Thermospannungssignalen kleine Spannungssprünge verborgen sind.

Falls anhaltende Spannungssprünge vorhanden sind, wird die Potentiallandschaft auf der Bi₂Se₃-Oberfläche des 4.5 QL dicken Bi₂Se₃ Films nicht durch diese Sprünge an Stufenkanten oder kleinen Bi₂Se₃-Inseln in erkennbarer Weise beeinflusst. Eigentlich würde man bei einem solch dünnen Film einen stärkeren Einfluss von Stufenkanten als Streuer erwarten. Allerdings liegt der Bi₂Se₃-Film aufgrund seiner Dicke von etwa 4.5 QL als Hybrid-TI vor (vgl. Kapitel 4.4.2): Die Eindringtiefe des TSS beträgt etwa 2.7 QL, sodass es zu einer großen Überlappung zwischen dem TSS der Vakuumseite und dem TSS an der Grenzfläche zum Substrat kommt und die beiden TSS hybridisieren. Hierdurch werden zusätzliche Streukanäle im entstehenden hybridisierten TSS geöffnet und die Mobilität der Ladungsträger an der Oberfläche gesenkt, sodass sich der elektrische Oberflächentransport drastisch vermindert, wie es auch Taskin et al. [133] für die Leitfähigkeit der Oberfläche bei dünnen Bi₂Se₃-Filme mit einer Dicke < 6 QL beobachtet haben. Man erkennt dies im vorliegenden hybridisierten TI-Film auch am globalen Schichtleitwert von $(280 \pm 20) \mu\text{S}$, der schon geringer ist als die reine Leitfähigkeit des unhybridisierten TSS auf der Vakuumseite ($\sigma_s = 400\text{--}800 \mu\text{S}$). Da der TSS nicht mehr vorrangig an der Oberfläche lokalisiert ist, sondern als hybridisierter Zustand das gesamte Volumen ausfüllt, spielen Oberflächendefekte für den Hybrid-TSS eine geringere Rolle. Daher wird kein signifikanter Anteil des lateralen Stroms entlang der Bi₂Se₃-Oberfläche geführt, sondern der Elektronentransport verteilt sich gleichmäßig auf das gesamte Filmvolumen und der Einfluss von Oberflächendefekten auf den Elektronentransport reduziert sich ebenfalls. Zudem können durch die Präparation Se-Fehlstellen entstehen, die im Volumen des Bi₂Se₃-Films zusätzliche Transportkanäle schaffen, die die Bedeutung des Filmvolumens für den Elektronentransport weiter steigern.

Insgesamt bedeutet dies, dass für den vorliegenden dünnen Bi₂Se₃-Film der Elektronentransport vor allem im Filmvolumen stattfindet, d. h., die Streuung im Filmvolumen dominiert den Elektronentransport und der Einfluss der Oberflächenmorphologie tritt in den Hintergrund.

5.3 Bi₂Se₃-Film mit einer Schichtdicke von 14.5 QL

Nachfolgend wird die Untersuchung eines etwa 14.5 QL dicken Bi₂Se₃-Films auf Si(111) gezeigt, die bereits im Rahmen meiner Masterarbeit von mir durchgeführt wurde [15]. Gemäß dem Quantenphasendiagramm von Bi₂Se₃ in Kapitel 4.4.2 sollte bei dieser Schichtdicke ein reiner TI-Film vorliegen. Im Rahmen des Promotionsstudiums wurden die Messdaten teilweise neu ausgewertet und tiefergehend interpretiert. Die Ergebnisse wurden zusammen mit C. A. Bobisch in der Fachzeitschrift *Nature Communications* [37] veröffentlicht.

5.3.1 Präparation

Die Präparation wurde wie beim 4 QL Bi₂Se₃-Film (siehe Kapitel 5.2.1) analog zu Zhang et al. [69] durchgeführt: Auf die α -Phase der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion (Bild 5.11a) wurde gleichzeitig Se (Reinheit 99.999 %, Rate (1180 ± 20) pm/min) und Bi (Reinheit 99.997 %, Rate (680 ± 10) pm/min) bei RT auf die Probe für 10 min gemeinsam aufgedampft (Druck ca. 4×10^{-9} mbar). Dies entspricht gemäß Gleichung (3.5) einem Teilchenverhältnis Se:Bi von etwa $(2.27 \pm 0.08):1$, d. h., gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis (1.5:1) lag ein Überschuss an Se vor. Mit Gleichung (3.6) ergibt sich eine Schichtdicke des gewachsenen Bi₂Se₃-Films von (13.8 ± 0.2) nm bzw. (14.5 ± 0.2) QL mit 1 QL = 952 pm gemäß Tabelle 4.2 ($\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c). Diese Schichtdicke liegt nach dem Quantenphasendiagramm von Bi₂Se₃ (Kapitel 4.4.2) weit über dem kritischen Wert von 6 QL für die TI-Phase, sodass man eine vollständige Entkopplung des TSS auf der Grenzfläche zum Vakuum und des TSS auf der Grenzfläche zum Substrat im Bi₂Se₃-Film erwarten kann. Nach dem Aufdampfen zeigten sich im LEED nur schwache Reflexe des Bi₂Se₃-Films (Bild 5.11b). Tempern bis 120 °C wie bei Zhang et al. [69] reichte nicht aus, um die Kristallstruktur des Films zu verbessern. Daher wurde analog zu Vyshnepolski et al. [72] der Bi₂Se₃-Film auf 250 °C geheizt und dort für 120 min getempert. In Bild 5.11c ist ein LEED-Bild des getemperten Bi₂Se₃-Films zu sehen, das nun ein scharfes hexagonales Beugungsmuster zeigt. Dies impliziert einen kristallinen und geschlossenen Film, wobei sich analog zu Kapitel 5.1.1 durch Vergleich mit den Si-(1 \times 1)-Reflexe in der LEED-Aufnahme der $\sqrt{3}$ -Bi-Rekonstruktion (Bild 5.11a) eine Gitterkonstante von (418 ± 12) pm ergibt (Volumenwert 414 pm, vgl. Tabelle 4.2). Auch unter dem STM (Bild 5.11d) erscheint der Film flach, glatt und kristallin, wobei das gleiche Si-Substrat wie in den vorangegangenen Proben benutzt wurde. Dabei sind keine einzelnen Si-Stufen zu sehen, sondern der Film hat die Probe vollständig lagenweise überwachsen. Die einzelnen Lagen liegen dabei teilweise teppichartig übereinander und haben die Höhe von QL, wie man im Topographieprofil in Bild 5.11e sieht.

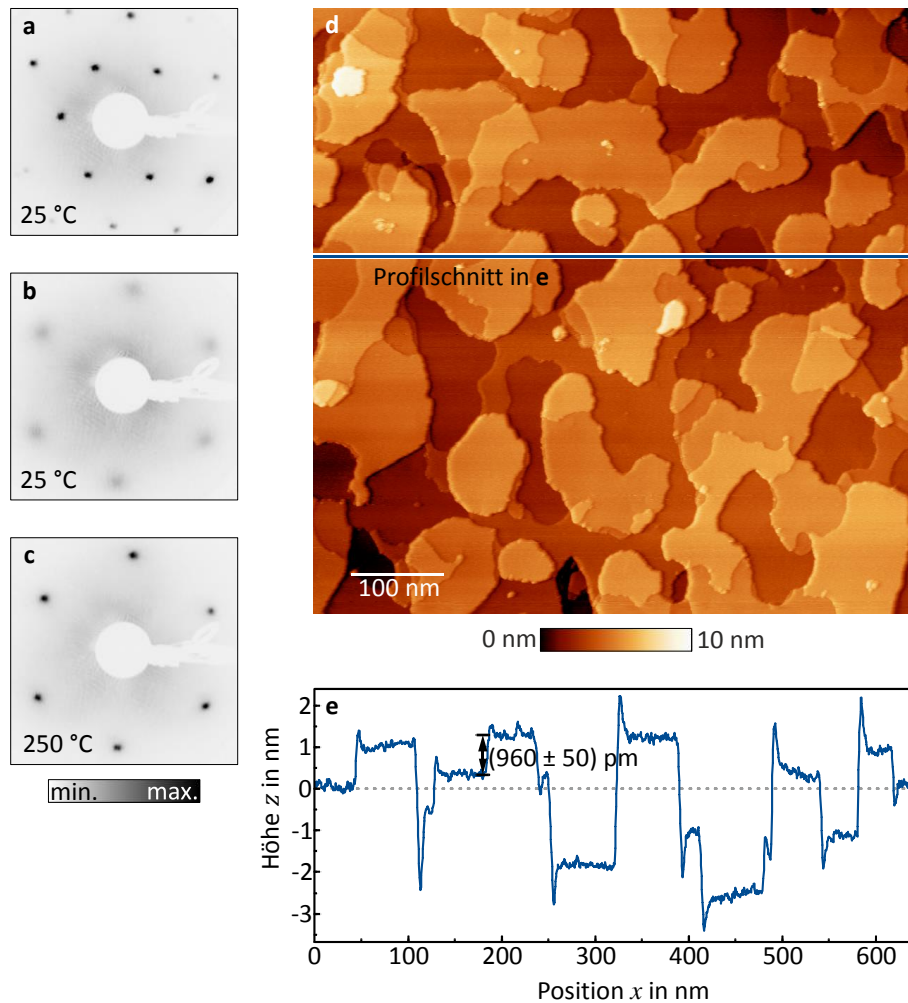


Bild 5.11 | Struktur des Bi₂Se₃-Films mit 14.5 QL Dicke. (a-c) LEED-Aufnahmen der Präparations-schritte für die Probe (Elektronenenergie 35 eV, Probentemperatur im jeweiligen LEED-Bild): (a) α -Phase der $\sqrt{3}\text{Bi}$ -Rekonstruktion auf Si(111). (b) 14.5 QL Bi₂Se₃-Film direkt nach dem Aufdampfen. (c) Auf 250 °C getemperter 14.5 QL Bi₂Se₃-Film. (d) STM-Aufnahme des 14.5 QL Bi₂Se₃-Films bei RT ($V_t = 1$ V, $I_t = 8$ pA, 640×640 nm²). (e) Profil über 4 Zeilen gemittelt durch d. Die Zipfel an den Stufenkanten sind Regelartefakte.

5.3.2 2PP-Messung

Analog zu den vorangegangenen Proben (Kapitel 5.1.2 und 5.2.2) wurde zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften eine 2PP-Messung durchgeführt. Da der Film im Vergleich mit dem schwach leitenden Si-Substrat (7.7 mS/cm) für den Elektronentransport den vorrangigen Transportkanal bildet, wird im Folgenden wie bei Kapitel 5.2.2 nur der Fall einer Schichtleitung betrachtet. Bild 5.12 zeigt die 2PP-Messung für den 14.5 QL dicken Bi₂Se₃-Film. Mittels zweier Kontaktspitzen aus Gold (Bild 5.12b) wurde für verschiedene Spitzenabstände d der Widerstand R ermittelt (Bild 5.12a), indem die Steigung der linearen I - V -Kennlinien zwischen den Spitzen gemessen wurde (vgl. Bild 9.6 in Kapitel 9.2.1).

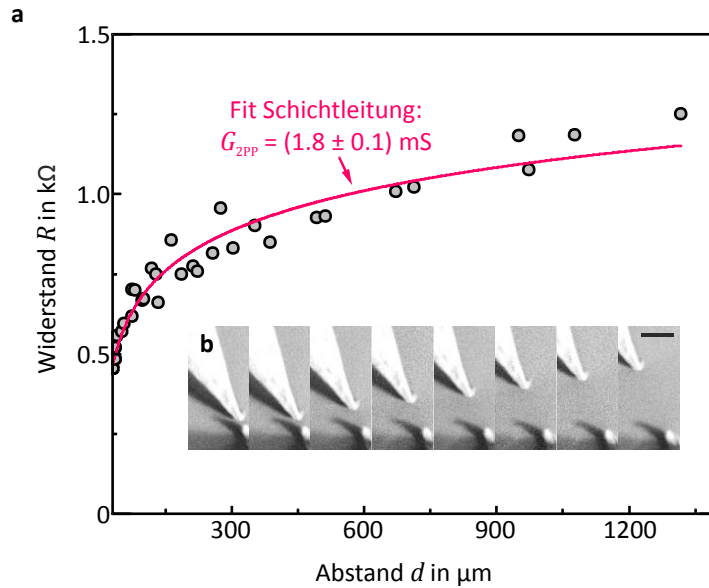


Bild 5.12 | 2PP-Messung auf dem 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film. (a) Auftragung des Widerstand R gegen den Abstand d der Kontaktspitzen. Messung bei RT. An die Messpunkte wurde der Fall einer Schichtleitung angefitet. (b) 2PP-Messschritte im SEM. Der schwarze Balken repräsentiert eine Länge von 50 μm . Darstellung ähnlich zu [37].

Dabei wurden für Spitzenabstände von 30-1300 μm Widerstände im Bereich von 0.5-1.3 $\text{k}\Omega$ gefunden. Mit zunehmendem Spitzenabstand nimmt dabei auch der Widerstand zu, wie man es auch dem theoretischen Verlauf für eine Schichtleitung gemäß Kapitel 2.3.3 erwartet. Der an die Messpunkte angepasste Fit für die Schichtleitung (Gleichung (2.49)) gibt den Verlauf der Messpunkte sehr gut wieder. Dabei wurde ein Schichtleitwert von $G_{2PP} = (1.8 \pm 0.1) \text{ mS}$ und ein mittlerer Kontaktradius der Kontaktspitzen von $r_k = (2.1 \pm 0.4) \mu\text{m}$ ermittelt.

5.3.3 STP-Messung

Bild 5.13 zeigt eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für den 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film. Der Abstand der Kontaktspitzen beträgt $d = (80 \pm 20) \mu\text{m}$. Für die STP-Messung wurde die Tunnelspitze mittig zwischen die beiden Kontaktspitzen gesetzt, sodass die Stromdichte sich mit Gleichung (5.3) abschätzen lässt.

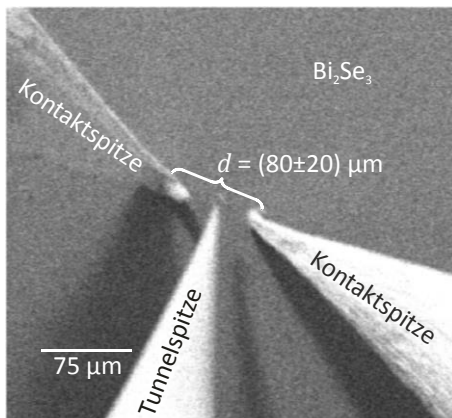


Bild 5.13 | STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung auf dem 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film. Bild nach [37].

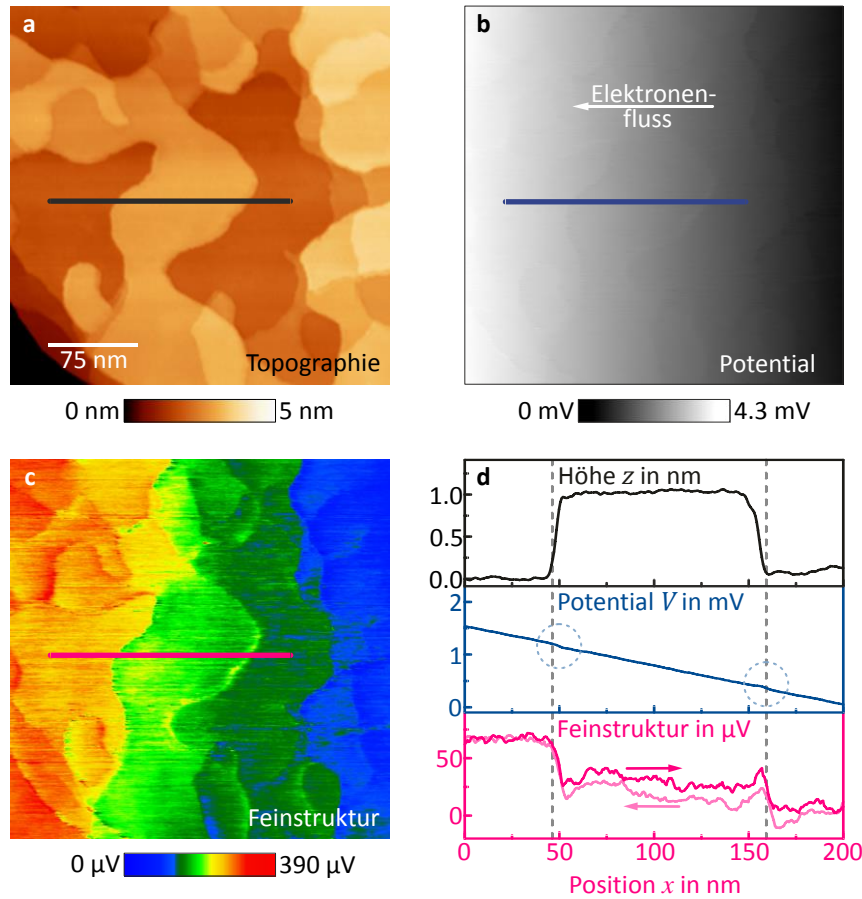


Bild 5.14 | STP-Messung an einer 1 QL-Stufe. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz, $I_t = 12 \text{ pA}$, $315 \times 315 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = -1.29 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1.925 \text{ mA}$. (a) Topographie des Bi₂Se₃-Films (QL-Stufen in der Mitte). (b) Potential des Bi₂Se₃-Films. (c) Feinstruktur des Potentials (Abzug des konstanten Gradienten auf den Terrassen). (d) Profillinien entlang der QL-Stufen (gemittelt über 7 Scanzeilen) aus den in a-c markierten Linien. Für die Feinstruktur ist in blasserer Farbe die Rückrichtung gezeigt. Darstellung aus [37].

Da ein Schichtleitcharakter vorliegt, wird hier die 2D-Stromdichte benötigt. Es gilt $j_{2D} = 2I_{\text{quer}}/(\pi d)$ nach Gleichung (5.3).

Bild 5.14 zeigt eine repräsentative STP-Messung, wobei der Elektronenfluss parallel zur schnellen Scanrichtung verläuft (von rechts nach links, Betrag des Querstroms 1.925 mA). Im Zentrum der STP-Messung (siehe die Topographie in Bild 5.14a) liegt eine QL auf der Bi₂Se₃-Oberfläche auf (vgl. Profil in Bild 5.14d). Bild 5.14b zeigt das simultan gemessene elektrochemische Potential (kurz Potential genannt). Das Potential wird in Richtung des Elektronenflusses von einem konstanten Gradienten $E = \Delta V/\Delta x = (72 \pm 4) \text{ V/cm}$ dominiert (siehe auch entsprechendes Profil in Bild 5.14d). Mit $I_{\text{quer}} = 1.925 \text{ mA}$ und $d = (80 \pm 20) \mu\text{m}$ folgt aus Gleichung (5.3) für die 2D-Stromdichte $j_{2D} = (150 \pm 30) \text{ mA/cm}$. Aus dem Ohmschen Gesetz ($j_{2D} = G \cdot E$) ergibt sich für den Schichtleitwert des Bi₂Se₃-Films $G_{\text{STP}} = j_{2D}/E = (2.1 \pm 0.6) \text{ mS}$. Zieht man den konstanten Terrassengradienten vom Potential in Bild 5.14b ab, wird eine „Feinstruktur“ des Potentials sichtbar, die in Bild 5.14c gezeigt ist.

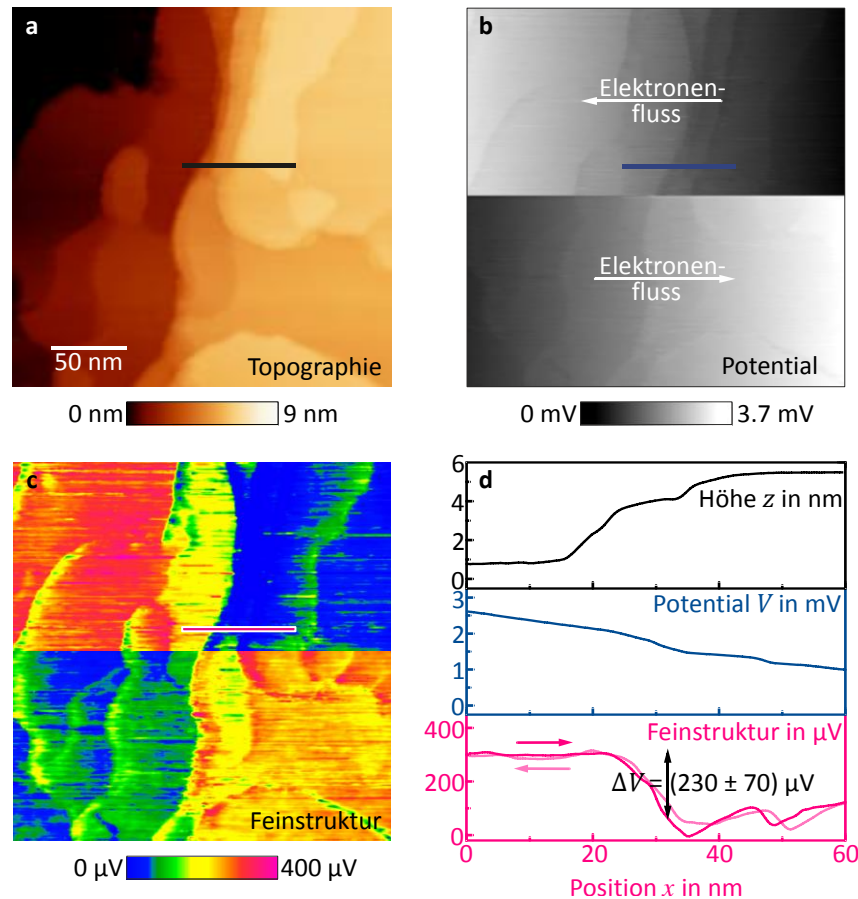


Bild 5.15 | STP-Messung an einer 3 QL-Stufe. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz, $I_t = 12 \text{ pA}$, $250 \times 250 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = \pm 2.11 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = \pm 3.29 \text{ mA}$. In der Bildmitte wurde die Polarität der Querspannung gewechselt. (a) Topographie des Bi_2Se_3 -Films (3 QL-Stufe in der Mitte). (b) Potential des Bi_2Se_3 -Films. (c) Feinstruktur des Potentials (Abzug des konstanten Gradienten auf den Terrassen). (d) Profillinien entlang der 3 QL-Stufe (gemittelt über 4 Scanzeilen) aus den in a-c markierten Linien. Für die Feinstruktur ist in blasserer Farbe die Rückrichtung gezeigt. Darstellung aus [37].

Die Feinstruktur enthält scharfe Spannungssprünge mit einem Betrag von 20-30 μV , die mit den Stufenkanten der Quintupellage in der Topographie korreliert sind (siehe hierzu die Profile in Bild 5.14d). Im Profil der Feinstruktur (Bild 5.14d) ist zusätzlich noch die Rückrichtung des Scans in blasserer Farbe dargestellt. Wie man erkennt, ist die Feinstruktur und besonders Betrag und Vorzeichen der Spannungssprünge, abgesehen von einer leichten Hysterese (wahrscheinlich durch die STP-Regelung verursacht), unabhängig von der Scanrichtung. Daher können die Spannungssprünge selbst nicht als Artefakt einer nicht ideal arbeitenden Regelschleife für den Tunnelstrom zurückgeführt werden (vgl. Bild 3.10, Regelkreis für z).

Bild 5.15 zeigt einen anderen Bereich der Bi_2Se_3 -Oberfläche. In der Bildmitte der Topographie (Bild 5.15a) ist eine 3 QL-Stufe auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche zu sehen, wobei der Elektronenfluss analog zu Bild 5.14 entlang der schnellen Scanrichtung verläuft. Bild 5.15b zeigt das zugehörige Potential. Neben dem dominierenden Gradienten sind dort – verglichen mit Bild 5.14b – bereits deutli-

chere Spannungssprünge zu erkennen. In der Mitte des Bildes wurde die Polarität der Querspannung umgekehrt, um den Einfluss eines um 180° gedrehten Elektronenflusses auf das Potential zu untersuchen. Der Gradient und auch die Spannungssprünge drehen ebenfalls ihr Vorzeichen, wenn der Elektronentransport seine Richtung wechselt. Deutlicher kann man in der Feinstruktur (Bild 5.15c) sehen, dass die Spannungssprünge ihr Vorzeichen in Folge des Polaritätswechsels umkehren. Hierdurch kann man die Spannungssprünge eindeutig auf das Transportfeld zurückführen, d. h., sie sind eine Folge des Elektronentransports. Bild 5.15d zeigt ortsgleiche Profile durch die 3 QL-Stufe für die Topographie, das Potential und die Feinstruktur. Der mit der 3 QL-Stufe korrelierte Spannungssprung beträgt etwa $(230 \pm 70) \mu\text{V}$, wobei in Bild 5.15 ein Querstroms von $I_{\text{quer}} = 3.28 \text{ mA}$ vorliegt. Hieraus folgt mit Gleichung (5.3) eine 2D-Stromdichte von $j_{2D} = (260 \pm 70) \text{ A/cm}$.

Wie in Kapitel 2.2.4 erläutert kann es im Rahmen der Abbildung der Probenoberfläche durch die Tunnelspitze auch zu Artefaktbildung im gemessenen Potential kommen. Daher wird die gefundene Potentialstruktur diesbezüglich im Folgenden untersucht. Hierfür wurde eine Simulation des Abbildungsprozesses sowohl für eine Einzelspitze wie auch für eine Doppelspitze durchgeführt (siehe hierzu auch den Anhang (Kapitel 9.4.1)). Die Ergebnisse der Simulation sind in Bild 5.16 gezeigt (Messdaten aus gleicher Messreihe wie bei Bild 5.14), wobei der Simulationsprozess im nachfolgenden Absatz erläutert wird.

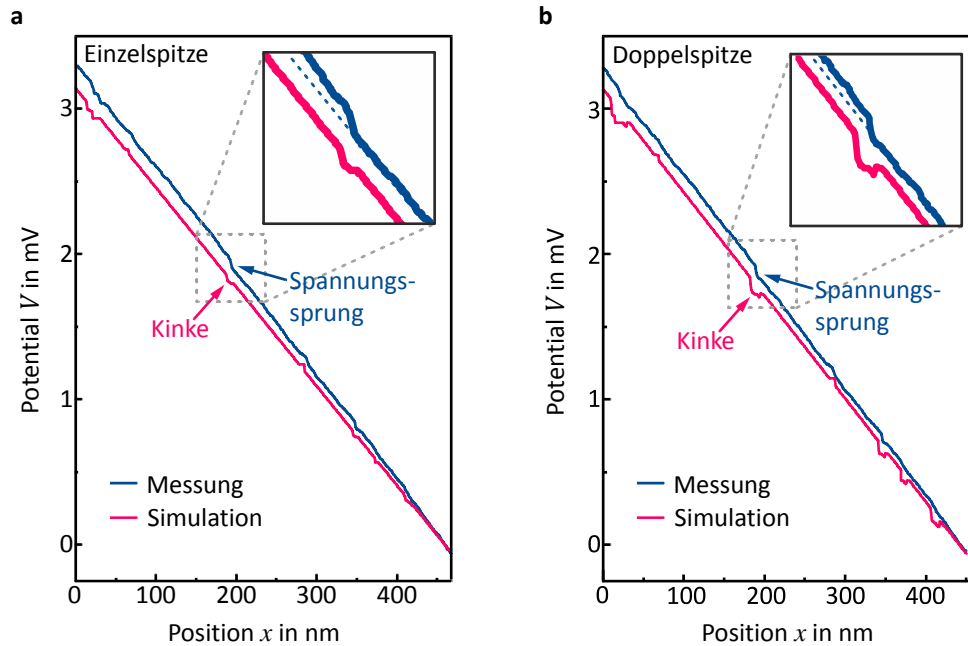


Bild 5.16 | Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Daten des Potentials. Gezeigt wird jeweils eine gemessene Potentiallinie aus der gleichen Messreihe wie bei Bild 5.14 ($V_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz , $I_t = 12 \text{ pA}$, $V_{\text{quer}} = -1.29 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1.925 \text{ mA}$, Messung bei RT) sowie eine simulierte Potentiallinie für den Fall einer Einzel- (a) bzw. Doppelspitze (b). Bild aus Appendix von [37].

Die Form der Einzelspitze wurde analog zu Kapitel 2.1.4 aus der Form der Stufenkanten abgeschätzt (siehe theoretischer Verbreiterungsprozess in Bild 2.4 und Bild 2.5 und im Vergleich dazu die Topographie in Bild 5.14d). Dabei wurde als optimale Spitzenform für eine Einzelspitze Folgendes gefunden (vgl. auch Bild 9.24a): Der Konus hat einen Öffnungswinkel von $\alpha = 140^\circ$ und einen Radius von $r = 8 \text{ nm}$ an seinem zulaufenden Ende. Der Apex wird von einer Kugelfläche mit einem Krümmungsradius von 15 nm gebildet. Als Potential für die Simulation wurde ein konstanter Gradient gleicher Richtung und Betrag wie der Gradient auf den Terrassen in Bild 5.14 genommen. In Bild 5.16a ist das Ergebnis der Simulation für das Potential gezeigt. Das simulierte Potential weist an der Position der Stufenkante kleine Kinken auf und kehrt schnell wieder zum Niveau des konstanten Gradienten zurück. Dagegen zeigen sich im gemessenen Potential an diesen Positionen Spannungssprünge, die zu einem andauernden Versatz gegenüber dem konstanten Gradienten führen. Da länger anhaltende Spannungssprünge auch durch eine Doppelspitze verursacht werden können (vgl. Kapitel 2.2.4 und Bild 2.13b), wurde aus der Form der Einzelspitze eine Doppelspitze konstruiert. Durch die Doppelspitze wechselt der Tunnelkontakt im Abstand d der beiden Apizes, sodass es zu einem Spannungssprung $\Delta V = E \cdot d$ kommt. Dabei ist E der Gradient des Potentials. Mit den aus Bild 5.14 gegebenen Werten für E und ΔV sowie im Rahmen der Optimierung des Simulationsprozesses wurde ein lateraler Versatz der Tunnelspitzen zu etwa 7.5 nm angenommen, wobei die beiden Apizes eine Höhendifferenz von 0.3 nm aufweisen. Man erkennt anhand von Bild 5.16b, dass sich in dem simulierten Potential nun breitere Potentialkinken von etwa 10 nm entsprechend dem Abstand der beiden Apizes der Doppelspitze befinden. Im Vergleich dazu zeigt das gemessene Potential einen Versatz, der weit über 100 nm nach dem Spannungssprung anhält. Daher können die Spannungssprünge an den Stufenkanten also nicht Folge einer Abbildung durch eine Doppelspitze sein.

5.3.4 STP-Studie einer 1 QL-Stufenkante

Um den Spannungssprung an der Stufenkante einer Quintupellage im Detail zu untersuchen, wurde auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche eine entsprechende Stufe herausgesucht und für verschiedene Querströme STP-Messungen vorgenommen. Um rauscharme Daten gewinnen zu können, wurde die STP-Aufnahme als schmales Rechteck gewählt (siehe Bild 5.17a). Dabei ist die schnelle Scanrichtung längs der langen Seite der STP-Aufnahme gewählt, so sodass man entlang der schmalen Seite die Scanzeilen mitteln kann. Die ausgesuchte Stufenkante liegt dabei für eine gute Mittelung möglichst in Richtung der kurzen Seite der STP-Aufnahme. Der Elektronentransport erfolgt längs der schnellen Scanrichtung der STP-Aufnahme und damit senkrecht zu der Stufenkante in Bild 5.17a. Dabei steht die Stufenkante – und damit verbunden der Potentialsprung – durch Drift während der Messung nicht ganz senkrecht zu den Scanzeilen.

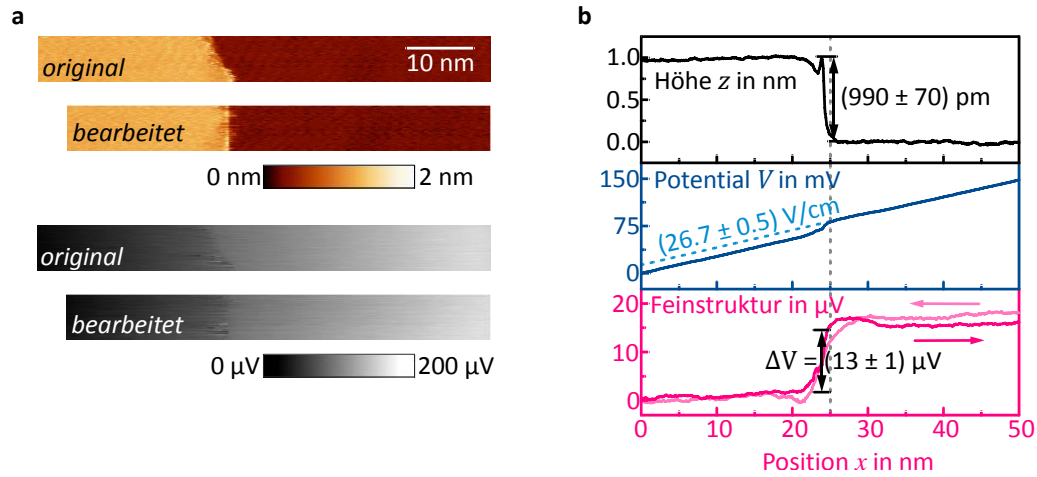


Bild 5.17 | STP-Analyse einer 1 QL hohen Bi₂Se₃-Stufe. (a) originale STP-Aufnahme ($V_{\text{mod}} = 2$ mV_{pp} mit 2.1 kHz, $I_t = 12$ pA, 67.4×6.7 nm², $V_{\text{quer}} = 0.60$ V und $I_{\text{quer}} = 0.77$ mA, Messung bei RT) und bearbeitete STP-Aufnahme. Man sieht deutlich, dass die Stufenkante gerade gerückt ist. (b) Mittelung über alle Scanzeilen für Topographie, Potential und Feinstruktur aus a. In der Feinstruktur ist in blasserer Farbe die Scanrückrichtung gezeigt. Darstellung nach Appendix in [37].

Daher wurde die Stufenkante mittels eines Programms (siehe hierzu Anhang in Kapitel 9.4.2) geradegerückt, sodass die Stufe senkrecht zur schnellen Scanrichtung steht (vgl. Bild 5.17a). In Bild 5.17b sind die über alle Scanzeilen gemittelten Profile aus Bild 5.17a gezeigt, die gegenüber den Profilen in Bild 5.14d ein deutlich verbessertes Signal-Rausch-Verhältnis haben. Die Stufenhöhe liegt mit (990 ± 70) pm im Bereich einer QL (952 pm). Im Potential kann der Spannungssprung bereits deutlich vom Gradienten auf den Terrassen unterschieden werden. Um den Gradienten auf den Terrassen zu bestimmen, wurde an die obere und untere Terrasse der QL-Stufe ein linearer Fit angepasst. Der gemittelte Gradient E_T aus den linearen Fits beider Terrassen beträgt dabei z. B. in Bild 5.17b $E_T = (26.7 \pm 0.5)$ V/cm. Aus dem Versatz der beiden linearen Fits am Ort der QL-Stufe ($x = 0$) wurde der Spannungssprung ermittelt, so z. B. in Bild 5.17b mit $\Delta V = (13 \pm 1)$ μ V. Das für Bild 5.17 beschriebene Vorgehen wurde für insgesamt 9 Aufnahmen für die positive und negative Scanrichtung durchgeführt (siehe auch Kapitel 9.3.1). Dabei wurde die Stärke des Querstroms von etwa -3 mA bis zu $+3$ mA in Schritten von ungefähr 0.75 mA variiert. In Bild 5.18a sind beispielhaft für die negative Scanrichtung die Potentialverläufe entlang der Stufenkante gezeigt (siehe hierzu auch den Anhang in Kapitel 9.3.1). Als Folge der höheren Stromdichte wird der Betrag von E_T und ΔV größer, wie man anhand der fächerartigen Form in Bild 5.18a sehen kann. Dabei skaliert die Auffächerung sehr linear mit dem angelegten Querstrom I_{quer} , wie die Auftragung von E_T über I_{quer} in Bild 5.18b zeigt (Datenpunkte aus beiden Scanrichtungen). Ein linearer Fit durch den Ursprung ergibt $I_{\text{quer}}/E_T = (289 \pm 3)$ S·nm. Ganz analog zeigt auch die Auftragung von ΔV an den Stufenkanten gegen I_{quer} in Bild 5.18b einen linearen Zusammenhang (Datenpunkte aus beiden Scanrichtungen), wobei ein linearer Fit durch den Ursprung $I_{\text{quer}}/\Delta V = (48 \pm 8)$ S ergibt.

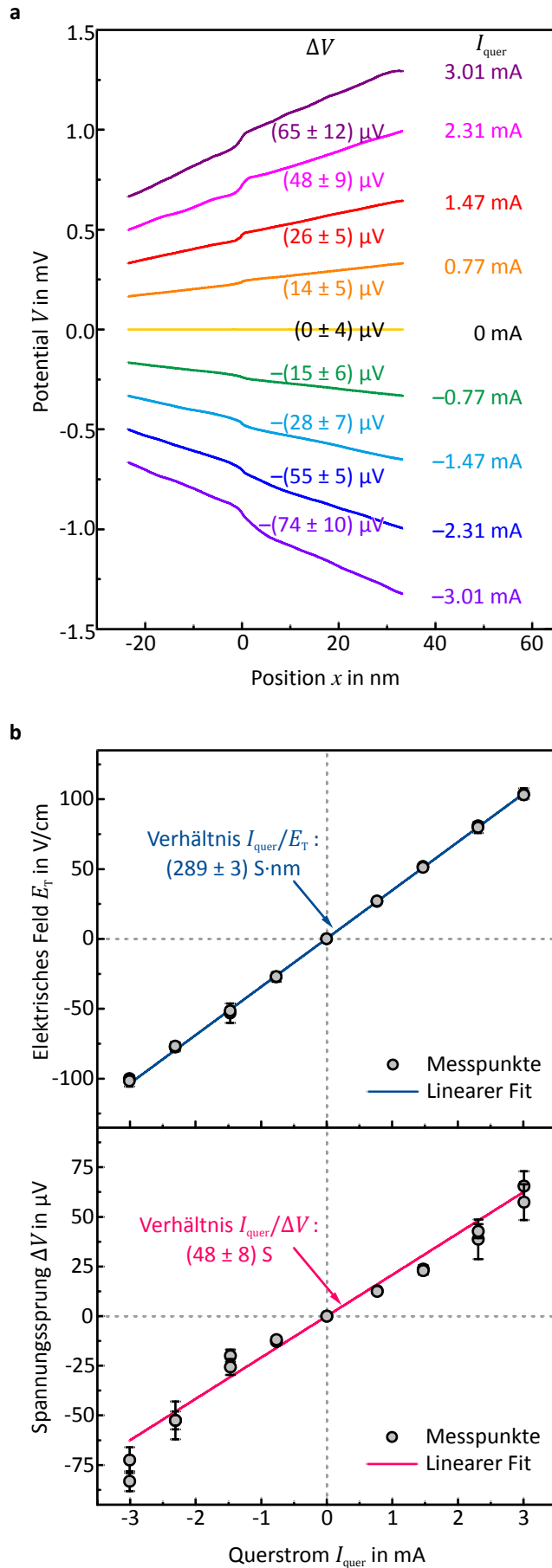


Bild 5.18 | STP-Studie einer 1 QL hohen Bi_2Se_3 -Stufe. (a) Gemittelte Profile des Potentials in Richtung des Elektronenflusses entlang der 1 QL Stufe für verschiedene Querströme I_{quer} (negative Scanrichtung, Messungen bei RT). Die Profillinien sind zur besseren Übersicht vertikal versetzt. Für jedes Profil wurde an die obere ($x < 0$) und an die untere Terrasse ($x > 0$) ein linearer Fit angelegt und aus dem Versatz beider Fits an der Position der Stufenkante ($x = 0$) der zugehörige Spannungssprung ΔV bestimmt. (b) Auftragung des mittleren Terrassengradienten E_T und des Spannungssprungs ΔV an der Stufenkante gegen den benutzten Querstrom I_{quer} für beide Scanrichtungen. An die jeweiligen Messpunkte wurde ein linearer Fit durch den Ursprung angepasst.

5.3.5 Diskussion

Die 2PP-Messung ergibt als globalen Schichtleitwert (μm -Skala) für den Bi₂Se₃-Film $G_{2PP} = (1.8 \pm 0.1) \text{ mS}$. Aus der STP-Messungen wurde als lokaler Schichtleitwert (nm -Skala) $G_{STP} = (2.1 \pm 0.6) \text{ mS}$ bestimmt. Beide Werte liegen nahe beieinander und überschneiden sich im Rahmen ihrer Fehler. Dies deutet auf eine Probe mit recht homogenen Leitungseigenschaften hin. Dabei sind die Schichtleitwerte vergleichbar mit Messungen aus der Literatur (z. B. 1.3 mS für einen 10 QL Bi₂Se₃-Film auf Saphir (0001) bei Taskin et al. [133]).

Lokal wurde mittels der STP-Messung vorrangig ein konstanter Gradient gefunden. Gemäß Kapitel 2.2.2 resultiert dieser Gradient wahrscheinlich aus der Streuung an Phononen als vorherrschendem Streuprozess, wie man es in der Literatur für Bi₂Se₃ auch in der topologischen Phase beobachtet hat (vgl. [138] und [139] sowie Kapitel 4.4.3).

Dem Gradienten überlagert wurden Spannungssprünge im Bereich von 20-250 μV gefunden, die mit Einfach- und Mehrfach-QL-Stufen korreliert sind. Für die Spannungssprünge konnte im Rahmen der Messungen sowie durch eine Simulation der STP-Messung (siehe auch den Anhang (Kapitel 9.4.1)) ausgeschlossen werden, dass sie ein Artefakt in Folge einer nicht ideal arbeitenden Regelung oder Thermospannung sind. Sie sind eindeutig auf den Elektronentransport zurückzuführen. Dies ist bemerkenswert, da sie im Vergleich zu anderen STP-Messungen, bei denen Spannungssprünge gefunden wurden, verhältnismäßig klein (20-250 μV) und teilweise nahe der Auflösungsgrenze der vorliegenden STP-Messung sind (5-10 μV , siehe Feinstruktur in Bild 5.14d). So wurde z. B. auf der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Ag-Rekonstruktion [108] und an Graphen auf SiC(0001) [110] Spannungssprünge im Bereich um 1-10 mV mit einem Messrauschen $< 100 \mu\text{V}$ gemessen.

In der STP-Messung wurden sowohl Spannungssprünge an 1 QL- als auch an 3 QL-Stufen gefunden, wobei nur für die 1 QL-Stufen eine detaillierte Analyse des Spannungssprungs ΔV in Abhängigkeit des Querstroms I_{quer} vorliegt (vgl. Bild 5.18b). Dabei ergab sich ein lineares Verhalten mit $I_{\text{quer}}/\Delta V = (48 \pm 8) \text{ S}$. Für die 3 QL-Stufe wurde ein Spannungssprung von etwa $(230 \pm 70) \mu\text{V}$ (vgl. Bild 5.15d) bei einem Querstrom von 3.29 mA gefunden, d. h. $I_{\text{quer}}/\Delta V = (14 \pm 4) \text{ S}$. Das Verhältnis $I_{\text{quer}}/\Delta V$ für die 3 QL-Stufe ist um den Faktor 3.4 ± 1.5 kleiner als bei der 1 QL-Stufe. Der Leitwert an wenigen QL hohen Stufen scheint annähernd linear mit der Zahl der QL-Stufen zu skalieren. Aus dem Topographieprofil in Bild 5.15d kann man nicht eindeutig erkennen, ob es sich um drei hintereinander verlaufende QL oder um eine einzelne 3 QL-Stufe handelt. Bei drei hintereinander verlaufenden 1 QL-Stufen sollte der Stufenwiderstand additiv sein, d. h., die Gesamtleitfähigkeit einer solchen 3 QL-Stufe sollte sich gegenüber der Leitfähigkeit einer 1 QL-Stufe um den Faktor 3 reduzieren. Bei einer durchgehenden 3 QL-Stufe muss kein linearer Zusammenhang bestehen, da sich die Überlappung des Elektronenzustandes oberhalb und unterhalb der 3 QL-Stufe im Vergleich zu einer 1 QL Stufe nicht im gleichen Maß reduzieren muss.

Die Spannungssprünge, insbesondere an den 1 QL-Stufen, sind in den hier gezeigten Messungen sehr klein im Vergleich zu den anderen Potentialmerkmalen und nahe dem Rauschen der Messung. Da hier ein Film von 14.5 QL Dicke vorliegt und die Streuung an der Position einer auf der Oberfläche aufliegenden Quintupellage stattfindet, sollte das Streuereignis nahe der Stufenkante lokalisiert sein. Diese Vermutung wird durch die Schärfe der kleinen Spannungssprünge in der STP-Messung gestützt, die nur durch eine Lokalisierung sehr nahe der Oberfläche hervorgerufen werden kann (vgl. private Mitteilung von M. Wenderoth in [37]). Daher zeigen die beobachteten Spannungssprünge auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche, dass die Oberfläche einen signifikanten Anteil am Elektronentransport in den vorliegenden STP-Messungen hat, d. h., ein merklicher Teil der Leitungselektronen wird wahrscheinlich über die TI-Oberfläche bei Raumtemperatur geführt. An der Oberfläche ist im Vergleich zum übrigen Filmvolumen vor allem der TSS lokalisiert (Eindringtiefe in das Filmvolumen gemäß Kapitel 4.4.2 etwa 2.7 QL), sodass im Folgenden die Streuung an den Stufenkanten auf den TSS zurückgeführt wird. Da im Rahmen der STP-Messung nur die Beiträge des TSS auf der Grenzfläche zum Vakuum beobachtet werden, wird als Wert für die Oberflächenleitfähigkeit des TSS $\sigma_s = 0.4\text{--}0.8\text{ mS}$ von Steinberg et al. [86] benutzt (vgl. auch Tabelle 4.4). Damit ergibt sich ein Anteil des TSS am Gesamtelektronentransport in dem hier vorliegenden 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film von etwa $\sigma_s/G = 30\%$, wie es auch Taskin et al. [133] für Filme um 10 QL gefunden haben. Der Hauptteil des Stroms (ca. 70 %) wird über das Filmvolumen getragen, wie man es auch aufgrund der n-Dotierung des Bi_2Se_3 -Films durch die Ausbildung von Se-Leerstellen während des Filmwachstums erwartet (siehe hierzu Kapitel 4.2.3). Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Dotierung so stark ist, dass das chemische Potential des Bi_2Se_3 -Film in Richtung des Leitungsbandes verschoben ist und hierdurch zusätzliche Streukanäle in den Volumenzuständen entstehen (siehe auch Bild 4.14a). Da hierdurch auch die Leitfähigkeit im TSS reduziert wird, stellt der benutzte Wert der Leitfähigkeit im TSS an der Bi_2Se_3 -Oberfläche von $\sigma_s = 0.4\text{--}0.8\text{ mS}$ einen Maximalwert dar und kann in Wirklichkeit auch kleiner sein. Da der Stromanteil σ_s/G im TSS und damit einhergehend die nachfolgend ermittelten Leitfähigkeiten zu hoch eingeschätzt würden, würde damit die Relevanz der Stufenkanten für die Streuung von Leitungselektronen und damit für den gesamten Elektronentransport im TSS steigen. Daher würden die nachfolgend gemachten Aussagen nur noch stärker an Bedeutung gewinnen, sodass zusätzliche Streukanäle vom TSS in die Volumenzustände den nachfolgenden Erläuterungen nicht widersprechen.

Im Folgenden wird die Relevanz des beobachteten Spannungssprungs ΔV an der 1 QL-Stufe abgeschätzt, indem er mit der Potentialdifferenz ΔV_T im TSS auf den Terrassen verglichen wird. Nach den zuvor angestellten Überlegungen sollte ein Anteil von $\sigma_s/G = 30\%$ des Potentialgradienten E_T der Terrassen auf die Phononenstreuung der Leitungselektronen im TSS entfallen. Gemäß der Übersichtsaufnahme in Bild 5.11d hat eine typische Terasse auf dem Bi_2Se_3 -Film eine Breite von etwa $b = 100\text{ nm}$, sodass entlang einer Terasse eine Potentialdifferenz von $\Delta V_T = \sigma_s/G \cdot E_T \cdot b$ im TSS einstellt. In Bild 5.18b sind die Verhält-

nisse zu $I_{\text{quer}}/E_T = 289 \text{ S}\cdot\text{nm}$ und $I_{\text{quer}}/\Delta V = 48 \text{ S}$ bestimmt worden. Man kann hieraus $\Delta V/\Delta V_T$ berechnen:

$$\frac{\Delta V}{\Delta V_T} = \frac{\Delta V}{\frac{\sigma_s}{G} \cdot E_T b} = \frac{1}{\frac{\sigma_s}{G} b} \cdot \frac{I_{\text{quer}}/E_T}{I_{\text{quer}}/\Delta V}. \quad (5.7)$$

Durch Einsetzen ergibt sich einen Anteil von $\Delta V/\Delta V_T = 20 \%$ der Stufenkante am Elektronentransport im TSS, d. h. die Stufenkanten stellen für den Elektronentransport im TSS von Bi₂Se₃ einen signifikanten Beitrag dar. Für höhere Stufendichte steigt entsprechend die Bedeutung der Stufenkanten für den Elektronentransport in der Bi₂Se₃-Oberfläche.

Im Folgenden soll die Leitfähigkeit einer Stufenkante berechnet werden. Da der Querstrom I_{quer} bzw. die zugehörige lokale Stromdichte $j_{2D,s}$ im TSS auf der Bi₂Se₃-Oberfläche gemäß Bild 5.18 linear zum Spannungssprung ΔV an der 1 QL-Stufe verläuft, kann man ein „Ohmsches Gesetz“ hierfür aufstellen:

$$j_{2D,s} = \sigma_{1QL} \cdot \Delta V. \quad (5.8)$$

Dabei ist σ_{1QL} die Leitfähigkeit einer 1 QL-Stufe mit der Dimension Leitwert je Länge. Wenn man den Umstand einbezieht, dass für den Spannungssprung nur der Anteil σ_s/G des lokalen Elektronentransports im TSS an der Bi₂Se₃-Oberfläche eine Rolle spielt, ergibt sich die abgeschätzte Stromdichte $j_{2D,s}$ im TSS aus dem Produkt von σ_s/G und j_{2D} zu $j_{2D,s} = \sigma_s/G \cdot j_{2D}$. Beachtet man weiter, dass für den berechneten Schichtleitwert $G = j_{2D} \cdot E$ gilt, folgt aus Gleichung (5.8) für die Leitfähigkeit σ_{1QL} der 1 QL-Stufe

$$\sigma_{1QL} = \frac{j_{2D,s}}{\Delta V} = \frac{\sigma_s}{G} \cdot \frac{j_{2D}}{\Delta V} = \frac{\sigma_s \cdot E}{j_{2D}} \cdot \frac{j_{2D}}{\Delta V} = \frac{\sigma_s \cdot E}{I_{\text{quer}}} \cdot \frac{I_{\text{quer}}}{\Delta V}. \quad (5.9)$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass gemäß Gleichung (5.3) für die abgeschätzte Stromdichte $j_{2D} = 2I_{\text{quer}}/(\pi d)$ gilt (d ist der Abstand zwischen den Kontaktspitzen). Aus Bild 5.18b ist $I_{\text{quer}}/\Delta V = (48 \pm 8) \text{ S}$ gegeben und für die Berechnung des Schichtleitwerts G des Bi₂Se₃-Films wurde $E = (72 \pm 4) \text{ V/cm}$ und $I_{\text{quer}} = 1.925 \text{ mA}$ verwendet. Gemäß [86] ist $\sigma_s = (0.6 \pm 0.2) \text{ mS}$, sodass sich eine Leitfähigkeit der 1 QL-Stufe von $\sigma_{1QL} = (1080 \pm 540) \text{ S/cm}$ ergibt.

Zwar liegt für eine 3 QL-Stufe keine detaillierte STP-Studie für die Bestimmung von $I_{\text{quer}}/\Delta V$ vor, dennoch kann man aus den STP-Messungen in Kapitel 5.3.3 für die 3 QL-Stufe (siehe auch Bild 5.15) eine grobe Abschätzung machen. In der Messung in Bild 5.15 lag ein Spannungssprung an einer 3 QL-Stufe von etwa $\Delta V = (230 \pm 70) \mu\text{V}$ bei einem Querstrom von $I_{\text{quer}} = 3.29 \text{ mA}$ vor, sodass für das Verhältnis $I_{\text{quer}}/\Delta V = (14 \pm 4) \text{ S}$ folgt. Mit $E = (72 \pm 4) \text{ V/cm}$ und $I_{\text{quer}} = 1.925 \text{ mA}$ aus der Berechnung des Schichtleitwerts G sowie $\sigma_s = (0.6 \pm 0.2) \text{ mS}$ ergibt sich nach Gleichung (5.9) ein Wert von etwa $\sigma_{3QL} = 310 \pm 190 \text{ S/cm}$ für die 3 QL-Stufe im TSS, also in etwa $\frac{1}{3}$ des Werts für eine 1 QL-Stufe.

Die beobachteten Spannungssprünge zeigen, dass die QL-Stufenkanten wie nanoskalige Widerstände wirken, die lokal die Leitungselektronen streuen. Diese Beobachtung entspricht den theoretischen Erwartungen und bisherigen ex-

perimentellen Befunden (vgl. Wang et al. [128] sowie Kapitel 4.4.3). Dabei sei angemerkt, dass bei Wang et al. [128] zur Streuung von Stufenkanten auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche vornehmlich STS-Experimente durchgeführt wurden, bei denen die Streuung ohne einen Elektronentransport entlang der Oberfläche beobachtet wurde. Bei den vorliegenden STP-Messungen lag ein solcher lateraler Elektronentransport vor, wie man ihn auch bei Bauelementen vorfindet, sodass die QL-Stufen hier unter realistischen Transportbedingungen als Widerstände für den elektrischen Elektronentransport identifiziert wurden.

5.4 Gestufte Bi_2Se_3 -Oberfläche

Ergänzend zum vorangegangenen Kapitel 5.3 wurde eine Transportstudie an einem 16 QL dicken Bi_2Se_3 -Film durchgeführt, dessen Oberfläche eine gleichmäßige Stufung mit 1 QL-Stufen des Bi_2Se_3 aufweist. Die Messungen wurden vollständig im Rahmen des Promotionsstudiums ohne Mitarbeit Dritter durchgeführt. Zusammen mit C. A. Bobisch wurden die Ergebnisse in der Fachzeitschrift *Journal of Physics: Condensed Matter* [140] publiziert.

5.4.1 Präparation

Die Präparation wurde ähnlich zur Präparation des 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film durchgeführt (siehe Kapitel 5.3.1): Zunächst wurde auf der $\text{Si}(111)-(7\times 7)$ (siehe LEED-Aufnahme in Bild 5.19a) über Bedampfung mit Bi und anschließendem Tempern auf 450°C die α -Phase der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\text{R}30^\circ\text{-Bi}$ -Rekonstruktion gebildet (Bild 5.19b). Danach wurden Se (Reinheit 99.999 %, Rate $> (890 \pm 20) \text{ pm/min}$) und Bi (Reinheit 99.997 %, Rate $500 \pm 10 \text{ pm/min}$) gleichzeitig für 15 min bei RT auf die Probe zusammen aufgedampft (Kammerdruck ca. $6 \times 10^{-9} \text{ mbar}$). Dies entspricht gemäß Gleichung (3.5) einem Aufdampfverhältnis Se:Bi von $> (2.32 \pm 0.09):1$, d. h., gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis (1.5:1) lag ein Überschuss an Se vor. Mit Gleichung (3.6) ergibt sich eine Schichtdicke des gewachsenen Bi_2Se_3 -Films von $(15.3 \pm 0.3) \text{ nm}$. Dies entspricht $(16 \pm 0.3) \text{ QL}$ mit $1 \text{ QL} = 952 \text{ pm}$ nach Tabelle 4.2 ($\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c). Die Schichtdicke von 16 QL liegt gemäß dem Quantenphasendiagramm von Bi_2Se_3 (Kapitel 4.4.2) weit über dem kritischen Wert von 6 QL für die TI-Phase, sodass man eine reine 3D TI-Phase hier für den Bi_2Se_3 -Film erwarten kann. Nach dem Aufdampfen zeigten sich in der LEED-Aufnahme des Bi_2Se_3 -Films (Bild 5.19c) nur schwach die Reflexe, sodass der Film wie in Kapitel 5.3.1 hochgeheizt wurde. Die Reflexe im LEED wurden bei einer Temperatur von 275°C scharf und der Film wurde bei dieser Temperatur anschließend für 90 min getempert.

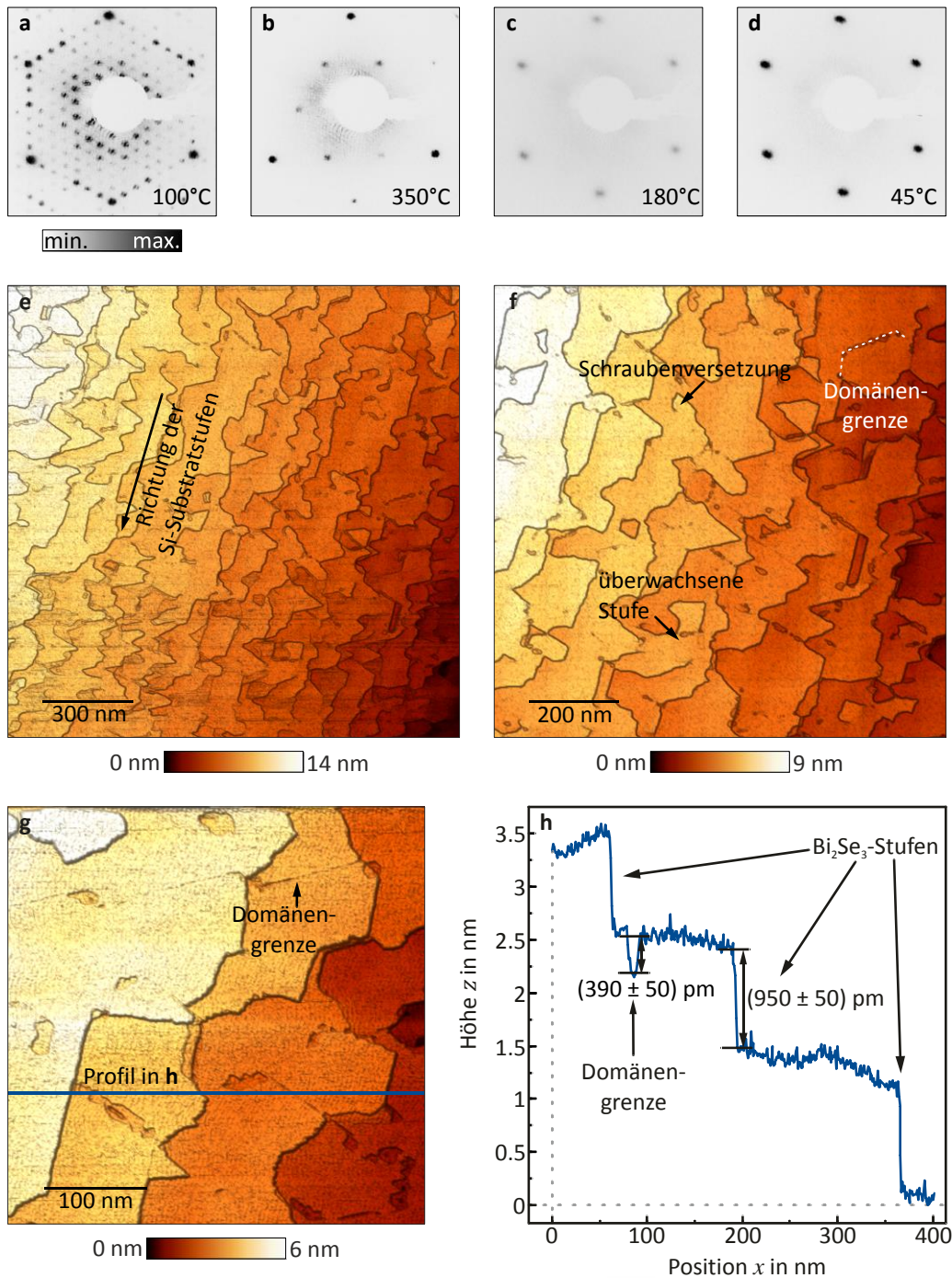


Bild 5.19 | Struktur des gestuften Bi₂Se₃-Films mit 16 QL Dicke. (a-d) LEED-Aufnahmen der Präparationsschritte für die Probe (Elektronenenergie 40 eV, Proben temperatur im jeweiligen LEED-Bild): (a) Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion. (b) α-Phase der $\sqrt{3}\sqrt{3}$ -Rekonstruktion auf Si(111). (c) 16 QL Bi₂Se₃-Film vor dem Tempern. (d) 16 QL Bi₂Se₃-Film nach dem Tempern auf 275°C. (e-h) STM-Studie des 16 QL Bi₂Se₃-Film ($V_t = 0.3$ V, $I_t = 8$ pA, Messung bei RT, Aufnahmen mit Beschattung). (e) Übersichtsaufnahme des gestuften Films (1.5 × 1.5 μm²). (f) Kleinere Aufnahme der Topographie aus e (1.0 × 1.0 μm²). (g) Aufnahme der Filmoberfläche mit 0.4 × 0.4 μm². (h) Profillinie entlang der in g eingezeichneten Linie (gemittelt über 7 Scanzeilen). Darstellung nach [140].

In Bild 5.19d ist ein LEED-Bild des getemperten Bi_2Se_3 -Films zu sehen, das ein scharfes hexagonales Beugungsmuster zeigt, wobei die LEED-Reflexe leicht oval verzerrt sind. Dies impliziert einen kristallinen, geschlossenen und gestuften Bi_2Se_3 -Film. Analog zu Kapitel 5.1.1 lässt sich mittels der Si-(1 \times 1)-Reflexe in Bild 5.19a eine Gitterkonstante von (409 ± 10) pm bestimmen (Volumenwert 414 pm, siehe Tabelle 4.2). Auch im STM (siehe Übersichtsaufnahme in Bild 5.19e) erscheint der Film kristallin und gestuft, wobei das gleiche gestufte Si-Substrat wie in den vorangegangenen Proben benutzt wurde. Die sichtbare Stufung des Films ist eine Anordnung mehr oder weniger parallel zueinander verlaufender Terrassen. Sie folgend weitestgehend der Richtung der Stufen des Substrats (siehe Pfeil in Bild 5.19e). Die Stufenkanten der Terrassen sind nicht gerade, sondern durch Vorsprünge und Mulden ausgefranst. Dabei scheinen sie alle in etwa die gleiche Höhe aufzuweisen. Die Terrassen haben im Mittel eine Breite von etwa 100 nm und es zeigen sich auf einer Länge von $1.5 \mu\text{m}$ etwa 17 ± 2 Stufen in Bild 5.19e. Dies entspricht einer Stufendichte von $n_{\text{st}} = (11 \pm 1) \mu\text{m}^{-1}$ und damit $\frac{1}{3}$ des Werts für die Dichte an Einzelstufen des Si(111)-Substrats (etwa $30 \mu\text{m}^{-1}$, siehe auch Kapitel 4.2.1). Die Höhe einer Si-Einzelstufe beträgt 313 pm und damit nahezu $\frac{1}{3}$ des Werts von 952 pm für eine 1 QL-Stufe, sodass sich wahrscheinlich auf der Substratoberfläche hauptsächlich Si-Dreifachstufen befinden, an die sich die QL stapelweise gut einfügt haben.

Der gesamte Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.19e erscheint relativ flach und glatt. Dies wird auch durch die relativ geringe z-Korrugation von 14 nm auf der großen Fläche von $(1.5 \times 1.5 \mu\text{m}^2)$ in Bild 5.19e untermauert. In Bild 5.19f ist ein größerer Ausschnitt auf der Oberfläche aus Bild 5.19e gezeigt. Über die gesamte Oberfläche ziehen sich Domänengrenzen, die in der Topographie als dünne Linien erscheinen (siehe auch Bild 5.19f). In manchen Bereichen sind diese Linien zu tiefen Ausfransungen aufgerissen. Die Verteilung der Domänengrenzen scheint insgesamt recht homogen und isotrop zu sein. Neben den Domänengrenzen finden sich auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche auch andere Defekte wie Schraubenversetzungen oder überwachsene Stufenkanten (siehe Bild 5.19d). Im Profil in Bild 5.19h entlang der in Bild 5.19g eingezeichneten Linie wird ersichtlich, dass die durch das Profil verlaufende Domänengrenze als (390 ± 50) pm tiefe Mulde erscheint und die einzelnen Stufen der Bi_2Se_3 -Oberfläche etwa (950 ± 50) pm hoch sind und damit der Höhe einer QL-Lage (952 pm) entsprechen.

5.4.2 2PP-Messung

Analog zu den vorangegangenen Proben wurde zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften eine 2PP-Messung durchgeführt. Da der Film im Vergleich mit dem schwach leitenden Si-Substrat (7.7 mS/cm) für den Elektronentransport den vorrangigen Transportkanal bildet, wird im Folgenden wie bei Kapitel 5.2.2 nur der Fall einer Schichtleitung betrachtet. In Bild 5.20 ist die 2PP-Messung für den gestuften, 16 QL dicken Bi₂Se₃-Film zu sehen. Mittels zweier Kontaktspitzen aus Gold wurde für verschiedene Spitzenabstände der Widerstand R parallel zu den Stufen (Bild 5.20b) und senkrecht zu den Stufen (Bild 5.20d) aus der Steigung der linearen I - V -Kennlinien zwischen den Spitzen ermittelt (vgl. Kapitel 9.2.1, Bild 9.7 und Bild 9.8). Bild 5.20a und Bild 5.20b zeigen die Auftragung des ermittelten Widerstand R über den Spitzenabstand d .

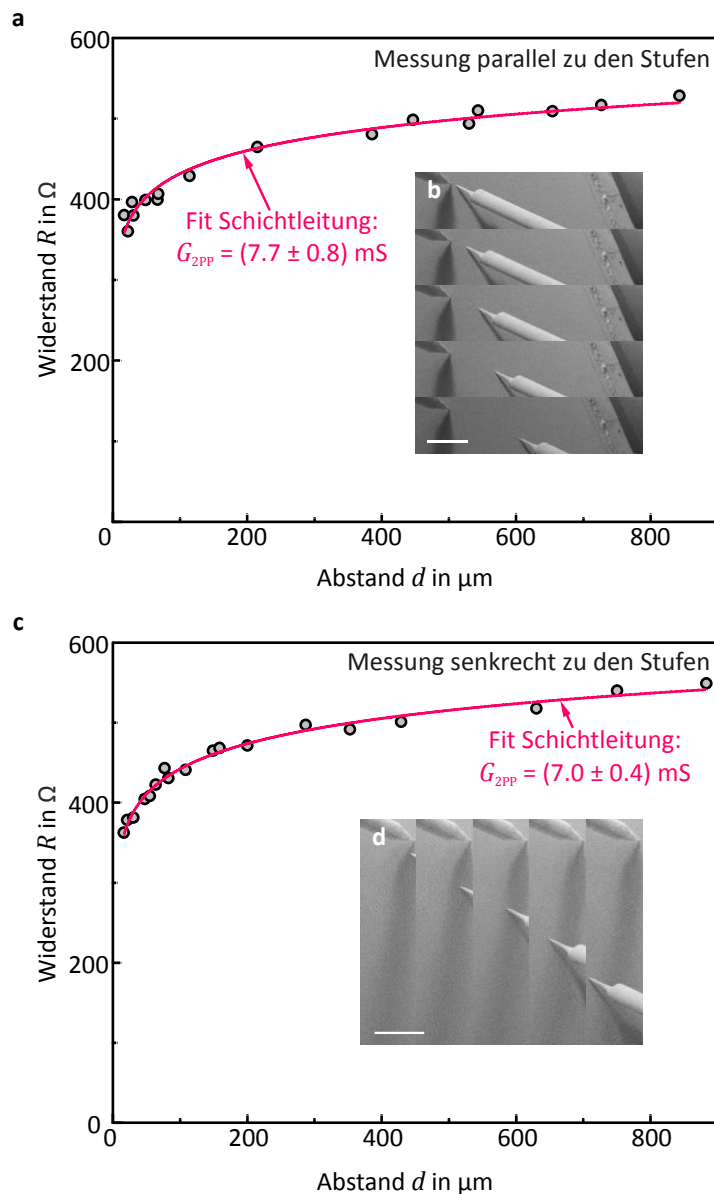


Bild 5.20 | 2PP-Messung auf dem gestuften Bi₂Se₃-Film. Auftragung des Widerstand R gegen den Abstand d der Kontaktspitzen (a) parallel zu den Stufen und (c) senkrecht dazu. Messung bei RT. An die jeweiligen Messpunkte wurde der Fall einer Schichtleitung angefitet. In die Diagramme sind die SEM-Aufnahmen der Messschritte jeweils eingefügt (b und d). Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von 300 μm . Darstellung ähnlich zu [140].

Dabei wurden im Fall der Messung parallel zu den Stufen mit Spitzenabständen von 20-840 μm Widerstände im Bereich von 360-530 Ω gefunden. Für den Fall der Messung senkrecht zu den Stufen wurden mit Spitzenabständen von 20-880 μm Widerstände im Bereich von 360-550 Ω gefunden. Mit zunehmendem Spitzenabstand nimmt dabei auch der Widerstand bei beiden Fällen zu, wie man es auch dem theoretischen Verlauf gemäß Kapitel 2.3.3 erwarten kann. Der an die Messpunkte in beiden Diagrammen angepasste Fit (Gleichung (2.49)) für die Schichtleitung gibt den Verlauf der Messpunkte sehr gut wieder. Für die 2PP-Messung parallel zu den Stufenkanten wurde ein Schichtleitwert von $G_{2PP,\parallel} = (7.7 \pm 0.8) \text{ mS}$ mit einem mittleren Kontaktradius der Kontaktspitzen von $r_k = (3 \pm 2) \text{ nm}$ ermittelt. Für die Messung senkrecht zu den Stufenkanten wurde ein Schichtleitwert von $G_{2PP,\perp} = (7.0 \pm 0.4) \text{ mS}$ mit einem mittleren Kontaktradius der Kontaktspitzen von $r_k = (7.0 \pm 0.2) \text{ nm}$ ermittelt. Die sehr kleinen Kontaktradien weisen auf einen hohen Kontaktwiderstand hin (vgl. Kapitel 5.2.2). Im Rahmen ihrer Fehler lassen sich $G_{2PP,\parallel}$ und $G_{2PP,\perp}$ nicht voneinander trennen.

5.4.3 4PP-Messung

Um den Schichtleitwert verlässlicher zu bestimmen, wurde zunächst eine lineare 4PP-Messung parallel und senkrecht zu den Stufen durchgeführt (vgl. Bild 5.21). Der äquidistante Abstand der Spitzen zueinander betrug in der linearen 4PP-Messung sowohl im parallelen als auch im senkrechten Fall $a = (80 \pm 5) \mu\text{m}$.

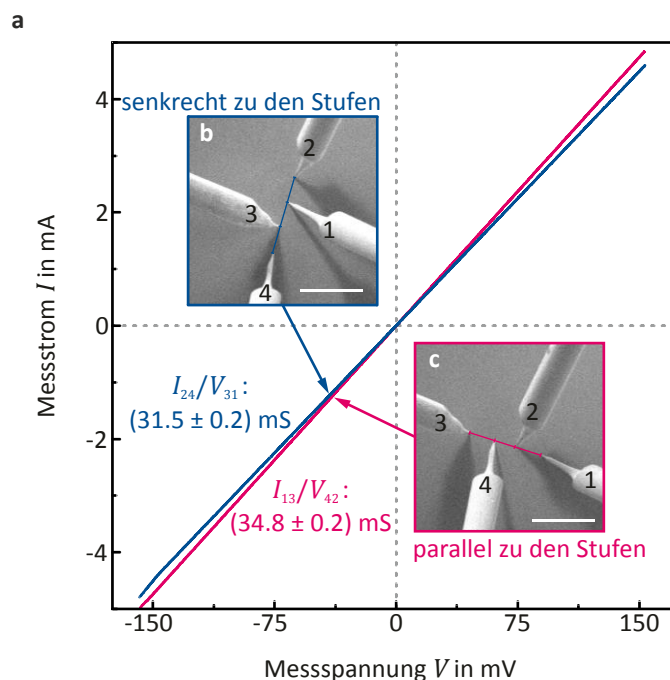
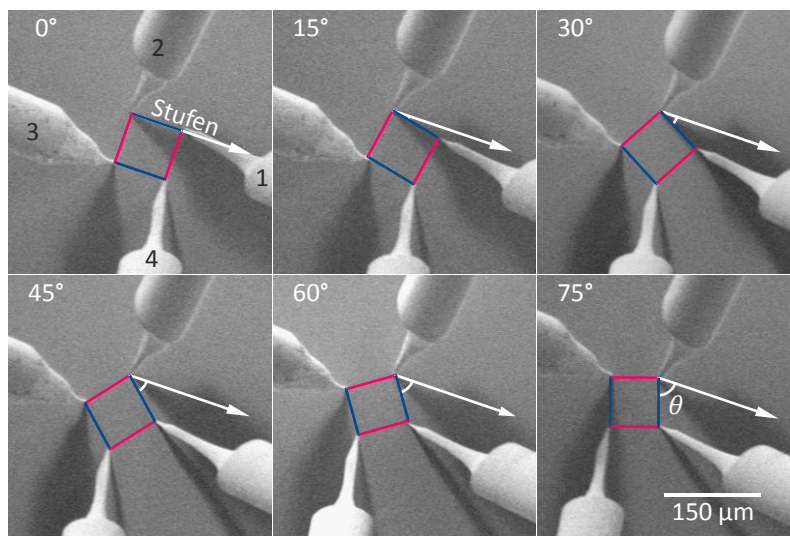


Bild 5.21 | Lineare 4PP-Messung auf dem gestuften Bi_2Se_3 -Film.

(a) Auftragung des Messstroms I zwischen den äußeren Spitzen gegen die über die inneren Spitzen ermittelte Messspannung V für den Fall (b) senkrecht zu den Stufen und (c) parallel zu den Stufen mit der jeweiligen Steigung I/V . Messung bei RT. In das Diagramm sind die SEM-Aufnahmen der Messgeometrie für die Fälle b und c eingefügt. Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von 200 μm . Darstellung aus [140].

Die Steigung der I - V -Kurven ergab sich für die 4PP-Messung parallel zu den Stufen $I/V = (31.5 \pm 0.2)$ mS und für die 4PP-Messung senkrecht zu den Stufen $I/V = (34.8 \pm 0.2)$ mS. Gemäß Gleichung (2.51) ist der Schichtleitwert G mit der Steigung I/V durch $G = \ln 2 / \pi \cdot I/V$ verknüpft. Damit ergibt sich für die 4PP-Messung parallel zu den Stufen $G_{4PP,\parallel} = (7.7 \pm 0.4)$ mS und für die Messung senkrecht zu den Stufen $G_{4PP,\perp} = (7.0 \pm 0.4)$ mS, d. h. die Leitwerte erscheinen auch hier verschieden zu sein. Um den Unterschied der Leitwerte in den verschiedenen Richtungen zweifelsfrei zu messen, wurde eine quadratische 4PP-Messungen durchgeführt (siehe Bild 5.22 und vgl. Kapitel 2.3.4).

a



b

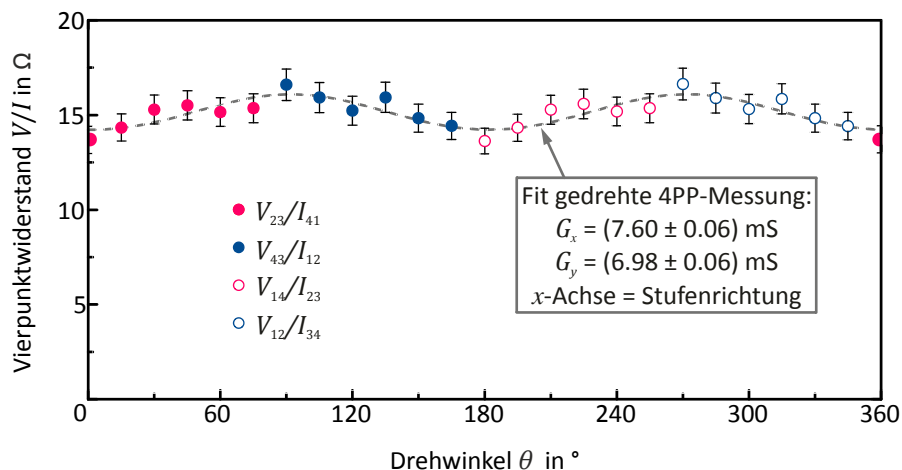


Bild 5.22 | Quadratische 4PP-Messung. (a) SEM-Aufnahmen der Kontaktgeometrie für verschiedene Drehwinkel θ . (b) 4PP-Widerstand V/I als Funktion des Drehwinkels θ . Der Widerstand zeigt dabei eine leichte periodische Abhängigkeit zum Winkel, d. h. eine leichte Leitungsanisotropie. Die einzelnen Fehlerbalken der Messpunkte repräsentieren den Maximalfehler (5 %), der sich aus dem Fehler der Ausgleichsgeraden für die 4PP I - V -Kurven und den Unsicherheiten aus der Messgeometrie für den Fit zusammensetzt. Der Verlauf der Messdaten wird durch den Fit mit Gleichung (2.57) gut wiedergegeben. Darstellung ähnlich zu [140].

Hierfür wurde die quadratische 4PP-Geometrie für verschiedene Drehwinkel θ zu den QL-Stufen auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche aufgebaut (siehe auch Bild 5.22a). Die quadratische 4PP-Geometrie wurde dabei von $\theta = 0^\circ$ in 15° -Schritten bis auf $\theta = 75^\circ$ gedreht. Für jede Drehposition wurde, wie in Kapitel 2.3.4 beschrieben, ein Strom durch zwei Spitzen geschickt und mit den beiden anderen Spitzen die Spannung auf der Oberfläche gemessen. Im Anhang (Kapitel 9.2.1) sind in Bild 9.9 einige 4PP-Kennlinien als Beispiele gezeigt. Durch zyklische Permutation der Strominjektion und Spannungsmessung konnten für jede quadratische 4PP-Geometrie mit dem Winkel θ weitere Winkel mit $\theta + 90^\circ$, $\theta + 180^\circ$ und $\theta + 270^\circ$ erfasst werden, sodass in der gesamten Messung der Winkelbereich von 0° bis 360° in Abständen von 15° durchschritten wurde. Durch Indizes in Bild 5.22a wurde gekennzeichnet, bei welcher Messung welche Spitzen den Strom in die Probe eingeprägt und welche Spitzen die Spannung auf der Probe gemessen haben. In Bild 5.22b ist der Verlauf des Vierpunktwidestands I/V bei der quadratischen 4PP-Messung über den benutzten Drehwinkel θ aufgetragen. Man sieht, dass der Vierpunktwidestand eine leichte periodische Abhängigkeit zum Drehwinkel aufweist. Ein Fit des Vierpunktwidestands nach Gleichung (2.57) reproduziert den Verlauf der Messdaten sehr gut. Dabei ist die Richtung der Stufen als x -Richtung in Gleichung (2.57) gesetzt (vgl. auch Bild 5.22a und Bild 2.19). Aus dem Fit ergibt sich $G_x = G_{\parallel} = (7.60 \pm 0.06) \text{ mS}$ als Leitwert parallel zu den Stufen und $G_y = G_{\perp} = (6.98 \pm 0.06) \text{ mS}$ als Leitwert senkrecht zu den Stufen. Ihr Verhältnis zueinander beträgt $G_{\perp}/G_{\parallel} = 1.09 \pm 0.02$.

5.4.4 STP-Messung

Da die vorliegende Probe eine Stufung in eine Richtung aufweist, wurden STP-Messungen mit einem Stromfluss parallel und senkrecht zu den Stufenkanten durchgeführt. In Bild 5.23 ist die Kontaktgeometrie für die STP-Messung parallel (Bild 5.23a) und senkrecht (Bild 5.23c) zu den Stufen auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche gezeigt. Da die Kontaktgeometrie bei beiden Messungen keine einfache Symmetrie aufweist, kann keine einfache Abschätzung für den Betrag der Stromdichte auf der Oberfläche nach Gleichung (5.1) erfolgen. Stattdessen wurden aus den SEM-Aufnahmen der Kontaktgeometrie die Position der Kontaktspitzen sowie die Position der Tunnelspitze bestimmt und in Gleichung (5.1) eingesetzt. Dabei ist die Bestimmung der Tunnelspitzenposition recht schwierig, da die Tunnelspitze an ihrem Ende verbogen ist und die Position des eigentlichen Spitzenapex an diesem gebogenen Ende nur grob aus dem Schattenwurf in Bild 5.23a geraten werden kann. Entsprechend führt die Unsicherheit der Tunnelspitzenposition zu einem größeren Fehler der berechneten 2D-Stromdichte. In Bild 5.23b und Bild 5.23d sind die berechneten Verläufe der Stromdichte auf der Probenoberfläche gezeigt. Zudem sind in Bild 5.23 sowohl in den SEM-Aufnahmen als auch den berechneten Verläufen der Stromdichte die vermuteten Positionen der Tunnelspitze und der Kontaktspitzen durch Punkte markiert.

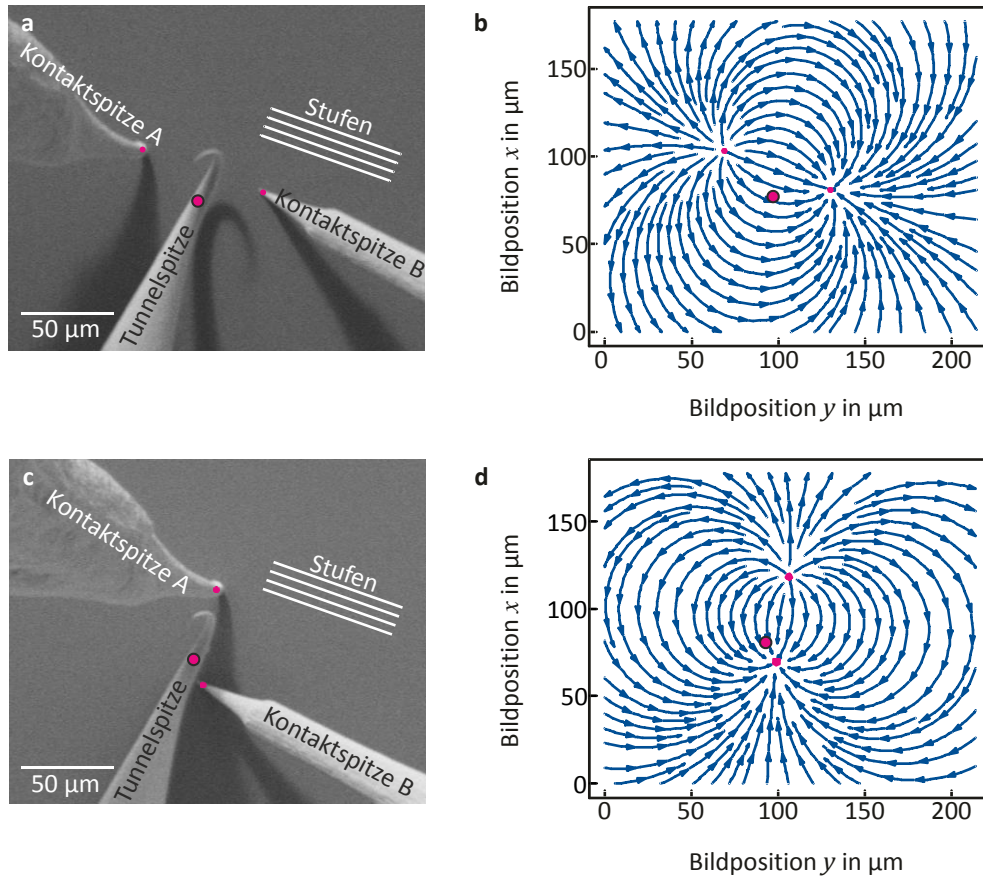


Bild 5.23 | STP-Geometrie. (a) und (c) zeigen die SEM-Aufnahmen der Kontaktgeometrie für die STP-Messung auf dem gestuften Bi₂Se₃-Film mit dem Stromfluss zwischen den Kontaktspitzen parallel (a) und senkrecht (c) zu den Stufenkanten. In (b) und (d) ist der nach Gleichung (5.1) berechnete Verlauf der 2D-Stromdichte auf der Bi₂Se₃-Oberfläche in a und c gezeigt. Die Punkte in den SEM-Aufnahmen bzw. in den berechneten Verläufen der 2D-Stromdichte sind die vermuteten Positionen von Tunnelspitze und Kontaktspitzen. Darstellung aus [140].

Bild 5.24 zeigt die STP-Messung mit dem Stromfluss parallel zu den Stufen auf der Bi₂Se₃-Oberfläche. Die Topographie (Bild 5.24a) weist dabei drei Stufen auf. Auf den zugehörigen Terrassen sind auch Domänengrenzen (DG) zu sehen, die als dünne bzw. ausgefranzte Linien auf der Bi₂Se₃-Oberfläche erscheinen. Das zugehörigen Potential (Bild 5.24b) wird von einem konstanten Gradienten beherrscht (siehe auch Profil in Bild 5.24d), der im Mittel einem Betrag des elektrischen Felds von etwa $E = (10.6 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ entspricht. Dabei deutet sich im Potential bereits eine Feinstruktur an. Zieht man den mittleren Gradienten in den Domänen (ca. $E_D = (9.7 \pm 0.1) \text{ V/cm}$) vom Potential ab, so wird die Feinstruktur deutlich erkennbar (Bild 5.24c). Es finden sich in der Feinstruktur scharfe und über die Länge einer Domäne beständige Spannungssprünge, die mit den DG in der Topographie korreliert sind. Gut erkennbar ist dies in den Profilen in Bild 5.24d, die ortsgleiche Profile durch die Topographie, das Potential und die Feinstruktur zeigen. Dabei sind die Spannungssprünge unabhängig von der Scanrichtung, wie man anhand der Rückrichtung der Feinstruktur in Bild 5.24d sieht (kein Artefakt der Tunnelstromregelung).

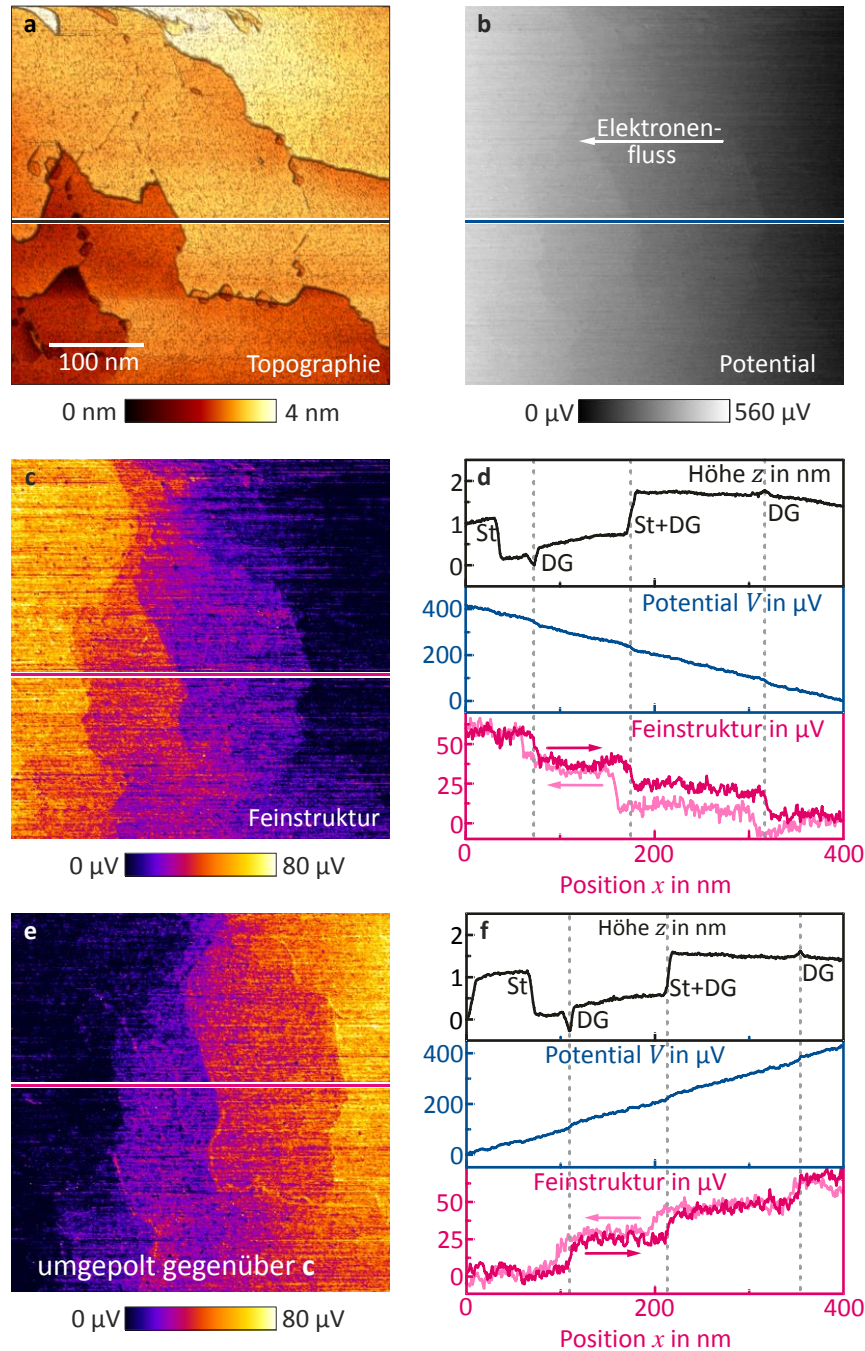


Bild 5.24| STP-Messung mit Stromfluss parallel zu den Stufen. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 3 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz, $I_t = 8 \text{ pA}$ und $400 \times 400 \text{ nm}^2$ mit $V_{\text{quer}} = -0.3 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1 \text{ mA}$ für **a-d** sowie $V_{\text{quer}} = +0.3 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +1 \text{ mA}$ für **e** und **f**. **(a)** Topographie (Aufnahme mit Beschattung), bestehend aus drei Stufen mit Domänengrenzen auf den Terrassen und über die Stufen hinweg. **(b)** Potential. **(c)** Feinstruktur des Potentials (Abzug des konstanten Gradienten auf den Terrassen). **(d)** Profillinien (gemittelt über 7 Scanzeilen) entlang der in **a-c** markierten Linien. In **(e)** und **(f)** sind die Feinstruktur und Profillinien der Topographie, des Potentials und der Feinstruktur an der gleichen Stelle wie in **d** für eine umgekehrte Polarität der Querspannung dargestellt. Für die Feinstruktur ist in blässerer Farbe die Rückrichtung in den Profillinien gezeigt. Folgende Abkürzungen werden verwendet: Domänengrenze (DG) und Stufe (St). Bild ähnlich zu [140].

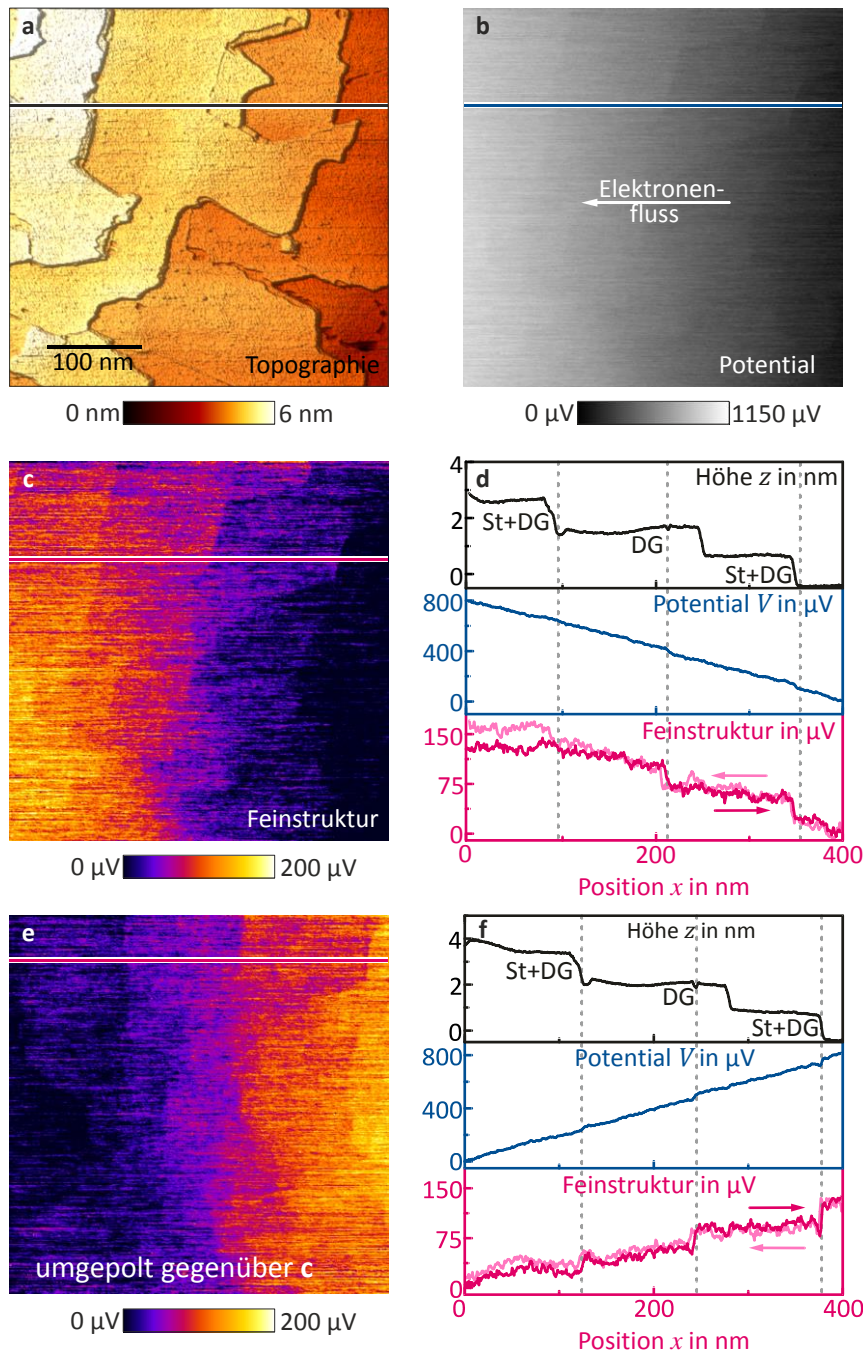


Bild 5.25 | STP-Messung mit Stromfluss senkrecht zu den Stufen. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 3 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz, $I_t = 8 \text{ pA}$ und $400 \times 400 \text{ nm}^2$ mit $V_{\text{quer}} = -0.71 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1.20 \text{ mA}$ für **a-d** sowie $V_{\text{quer}} = +0.70 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +1.22 \text{ mA}$ für **e** und **f**. **(a)** Topographie (Aufnahme mit Beschattung), bestehend aus drei Stufen mit Domänengrenzen auf den Terrassen und über die Stufen hinweg. **(b)** Potential. **(c)** Feinstruktur des Potentials (Abzug des konstanten Gradienten auf den Terrassen). **(d)** Profillinien (gemittelt über 7 Scanzeilen) entlang der in **a-c** markierten Linien. In **(e)** und **(f)** sind die Feinstruktur und Profillinien von Topographie, Potentials und Feinstruktur an der gleichen Stelle wie in **d** für eine umgekehrte Polarität der Querspannung dargestellt. Für die Feinstruktur ist jeweils in blässerer Farbe die Rückrichtung in den Profillinien gezeigt. Folgende Abkürzungen werden verwendet: Domänengrenze (DG) und Stufe (St). Bild ähnlich zu [140].

Zum Teil sind die Spannungssprünge auch mit Stufenkanten korreliert, allerdings nur, weil dort vermutlich auch eine DG verläuft. Im Rahmen der gegebenen Auflösung kann man im Potential bzw. der Potentialfeinstruktur keine Spannungssprünge an der Position der Stufenkanten ohne DG (z. B. in Bild 5.24 links) sehen. Lediglich in Bild 5.24 scheint ein schwacher Spannungssprung an der Stufenkante im Profil der Feinstruktur ausgebildet zu sein. Die mittlere Höhe eines Spannungssprungs an der DG beträgt $\Delta V = (19 \pm 2) \mu\text{V}$. In Bild 5.24e und Bild 5.24f sind zusätzlich die Feinstruktur sowie die Profile von Topographie, Potential und Feinstruktur an gleichen Position gezeigt, wenn die Querspannung bzw. der lokale Elektronenfluss umgekehrt wurde. Man sieht, dass die Spannungssprünge an den DG auf die Umdrehung des Transportfeldes reagieren, indem sie selbst ihre Richtung umkehren. Sie rühren also vom Transportfeld her. In Bild 5.24 ergibt sich gemäß Gleichung (5.1) aus dem Betrag des Querstroms $I_{\text{quer}} = 1 \text{ mA}$ sowie den Spitzenpositionen in Bild 5.23 als 2D-Stromdichte $j_{2\text{D}} = (80 \pm 12) \text{ mA/cm}$. Die Unsicherheit bleibt hier trotz der relativ undefinierten Tunnelspitzenposition in Bild 5.23 recht niedrig, da sich die berechnete Stromdichte im Bereich des Tunnelspitzenapex nur wenig verändert. Aus dem mittleren Gradienten $E = (10.6 \pm 0.2) \text{ V/m}$ des Potentials ergibt sich ein Leitwert parallel zu den Stufen von $G_{\text{STP},\parallel} = j_{2\text{D}}/E = (7.5 \pm 1.1) \text{ mS}$.

Bild 5.25 zeigt die STP-Messung mit dem Stromfluss senkrecht zu den Stufen auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche. Die Topographie (Bild 5.25a) weist wie bei Bild 5.24a etwa drei Stufen auf. Auf den zugehörigen Terrassen sind ebenfalls wieder die DG als dünne bzw. ausgefrante Linien auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche zu sehen. Das zugehörige Potential (Bild 5.25b) wird wieder von einem konstanten Gradienten bestimmt (siehe auch Profil in Bild 5.25d), der im Mittel einem Betrag von etwa $E = (19.8 \pm 0.3) \text{ V/cm}$ entspricht. Nach Abzug des Domänengradienten (ca. $E_{\text{D}} = (18.0 \pm 0.2) \text{ V/cm}$) vom Potential erscheinen in der Feinstruktur in Bild 5.24c scharfe und über die Länge einer Domäne beständige Spannungssprünge, die mit den DG in der Topographie korreliert sind (siehe auch Bild 5.25d). Die Spannungssprünge sind wieder unabhängig von der Scanrichtung. Da die Aufnahme gegenüber Bild 5.24 ein höheres Rauschniveau hat, sind zum Teil sogar die Spannungssprünge an den DG nicht im ganzen Bild klar erkennbar. Die mittlere Höhe eines Spannungssprungs an der DG beträgt etwa $\Delta V = (39 \pm 4) \mu\text{V}$. In Bild 5.25e und Bild 5.25f ist zusätzlich die Feinstruktur sowie die Profile von Topographie, Potential und Feinstruktur an der gleichen Position gezeigt, nachdem die Querspannung bzw. der lokale Elektronenfluss umgekehrt wurde. Die Spannungssprünge an DG reagieren wie zuvor auf die Umdrehung des Transportfeldes, indem sie ihre Richtung umkehren. Der Betrag der 2D-Stromdichte in Bild 5.25 ergibt sich gemäß Gleichung (5.1) aus dem Querstrom $I_{\text{quer}} = 1.2 \text{ mA}$ sowie den Spitzenpositionen in Bild 5.23 als $j_{2\text{D}} = (185 \pm 75) \text{ mA/cm}$. Die Unsicherheit wird hier wegen der relativ undefinierten Tunnelspitzenposition in Bild 5.23 hoch, da sich die berechnete Stromdichte im Bereich des Tunnelspitzenapex stark verändert. Aus der mittleren Steigung des Potentials ergibt sich ein Leitwert senkrecht zu den Stufen von $G_{\text{STP},\perp} = j_{2\text{D}}/E = (9.3 \pm 3.8) \text{ mS}$.

5.4.5 Diskussion

Im Rahmen der 2PP-Messungen und 4PP-Messungen wurde eine Anisotropie der globalen Leitwerte des Bi₂Se₃-Films parallel und senkrecht zu der Stufung auf der Oberfläche gefunden: Der Leitwert parallel zu den Stufen (G_{\parallel}) ist höher als der Leitwert senkrecht zu den Stufen (G_{\perp}). Eigentlich sollte sich eine solche Anisotropie nicht in der 2PP- und linearen 4PP-Messung nachweisen lassen, wenn der Leitwert des Bi₂Se₃-Film selbst bzw. die zugehörige Leitfähigkeit σ_{3D} des Volumenmaterials Bi₂Se₃ anisotrop ist (vgl. Kapitel 2.3.4 und [38]). Daher liegt die Ursache sehr wahrscheinlich in der Stufung des Substrats, wie man es schon aus den Ergebnissen in Kapitel 5.3 vermuten kann. Die verlässlichste Methode zur Bestimmung der Leitwerte G_{\parallel} und G_{\perp} ist die durchgeführte quadratische 4PP-Messung mit Drehung relativ zu der Stufung (siehe Bild 5.22). Dabei wurde $G_{\parallel} = (7.60 \pm 0.06) \text{ mS}$ und $G_{\perp} = (6.98 \pm 0.06) \text{ mS}$ gemessen. Die zuvor mittels 2PP- und linearer 4PP-Messung ermittelten Werte sind nahezu gleich: $G_{2PP,\parallel} = (7.7 \pm 0.8) \text{ mS}$ und $G_{4PP,\parallel} = (7.7 \pm 0.4) \text{ mS}$ sowie $G_{2PP,\perp} = (7.0 \pm 0.4) \text{ mS}$ und $G_{4PP,\perp} = (7.0 \pm 0.4) \text{ mS}$. Dies ist besonders für die 2PP-Messung bemerkenswert, weil die dort über den Fit von Gleichung (2.49) berechneten mittleren Kontaktradien der Kontaktspitzen unrealistisch kleine Werte von nur einigen Nanometer haben. Dies stützt die in Kapitel 5.2.2 vorgebrachte Argumentation, dass durch Kontaktwiderstände die ermittelten Kontaktradien schrumpfen, ohne dass sich der ermittelte Leitwert stark verändert. Die zuvor gefundenen globalen Leitwerte konnten lokal in ihrer Größenordnung zumindest bestätigt werden: Bei Stromfluss parallel zu der Stufung wurde ein lokaler Wert von $(7.5 \pm 1.1) \text{ mS}$ gefunden, der sehr nah an dem globalen Wert von (7.60 ± 0.06) liegt. Der lokale Leitwert senkrecht zu den Stufen wurde zu $(9.3 \pm 3.8) \text{ mS}$ bestimmt und weicht stark vom globalen Wert $(6.98 \pm 0.06) \text{ mS}$ ab. Im Rahmen seines Fehlers schließt der lokale Leitwert senkrecht zu den Stufen den globalen Wert mit ein, allerdings auch den lokalen Wert parallel zu den Stufen. Daher kann lokal in der STP-Messung aufgrund der hohen Fehler in Folge der nur recht ungenau bestimmbaren Tunnelspitzenposition keine Anisotropie nachgewiesen werden. Der sowohl global als auch lokal gefundene Leitwert für den Bi₂Se₃-Film von etwa 7 mS für 16 QL ist zwar deutlich höher als der Wert von etwa 2 mS für den Bi₂Se₃-Film von etwa 14.5 QL in Kapitel 5.3, er liegt aber im Rahmen dessen, was man in der Literatur auch vorfindet (z. B. 12 mS für eine 17 nm dicke Bi₂Se₃-Schicht bei Steinberg et al. [86]). Da die Anisotropie $G_{\perp}/G_{\parallel} = 1.09 \pm 0.02$ der Leitwerte mit der Richtung der Stufenkanten korreliert ist, müssen die Stufen selbst einen signifikanten Beitrag G_{St} zum Leitwert G_{\perp} senkrecht zur Stufung leisten. Unter der gemäß Kapitel 4.4.3 sinnvollen Annahme, dass die Streuung an den Stufenkanten unabhängig von der Streuung im Film selbst (G_{\parallel}) stattfindet, gilt die Mathiessenregel

$$\frac{1}{G_{\perp}} = \frac{1}{G_{\parallel}} + \frac{1}{G_{St}}. \quad (5.10)$$

Die in Kapitel 5.3.5 bestimmte Leitfähigkeit $\sigma_{1\text{QL}}$ einer einzelnen 1 QL-Stufe bezieht sich auf den Elektronentransport im topologischen Oberflächenzustand (TSS). Mittels des Faktors G_{\parallel}/σ_s kann $\sigma_{1\text{QL}}$ auf den Gesamtelektronentransport im Bi_2Se_3 -Film umgerechnet werden: $\sigma_{\text{St}} = G_{\parallel}/\sigma_s \cdot \sigma_{1\text{QL}}$. Dabei ist die Leitfähigkeit des TSS gemäß [86] $\sigma_s = (0.6 \pm 0.2) \text{ mS}$. Der Gesamtleitwert der Stufen ist analog zu [109] durch $G_{\text{St}} = \sigma_{\text{St}}/n_{1\text{QL}} = G_{\parallel}/\sigma_s \cdot \sigma_{1\text{QL}}/n_{1\text{QL}}$ gegeben. In Kapitel 5.4.1 wurde auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche als Dichte der 1 QL-Stufen $n_{\text{st}} = n_{1\text{QL}} = (11 \pm 1) \mu\text{m}^{-1}$ bestimmt. Aus Gleichung (5.10) ergibt sich dann

$$\sigma_{1\text{QL}} = n_{1\text{QL}} \cdot \frac{\sigma_s}{G_{\parallel}} \cdot G_{\text{St}} = n_{1\text{QL}} \cdot \frac{\sigma_s}{G_{\parallel}} \cdot \frac{G_{\parallel} \cdot G_{\perp}}{G_{\perp} - G_{\parallel}} = n_{1\text{QL}} \cdot \frac{\sigma_s \cdot G_{\perp}}{G_{\perp} - G_{\parallel}}. \quad (5.11)$$

Wenn $G_{\parallel} = (7.60 \pm 0.06) \text{ mS}$, $G_{\perp} = (6.98 \pm 0.06) \text{ mS}$, $n_{1\text{QL}} = (1.1 \pm 0.1) \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ und $\sigma_s = (0.6 \pm 0.2) \text{ mS}$ eingesetzt wird, ergibt sich eine Leitfähigkeit der 1 QL-Stufen von etwa $\sigma_{1\text{QL}} = (740 \pm 330) \text{ S/cm}$. Dieser Wert liegt in der gleichen Größenordnung wie der in Kapitel 5.3 aus den STP-Messungen für den 14.5 QL ermittelte Wert von etwa $(1080 \pm 540) \text{ S/cm}$. Im Rahmen ihrer Fehler überlappen sich beide Werte. Unter Berücksichtigung der Verschiedenheit beider Proben und der vielen Annahmen, die für die Berechnung der Werte gemacht werden mussten, ist die Übereinstimmung der Werte gut. Der höhere Leitwert des hier hergestellten, gestuften Bi_2Se_3 -Films kann mit einer Anhebung des chemischen Potentials im Bi_2Se_3 -Film korreliert sein, sodass es zur Streuung vom TSS bis in Volumenzustände kommen kann. Daher erscheint es plausibel, dass die Leitfähigkeit der 1 QL-Stufe hier gegenüber dem 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film in Kapitel 5.3 durch zusätzliche Streuung in Volumenzustände verkleinert ist. Da auch σ_s im TSS dann verkleinert wäre, stellt der hier ermittelte Wert für die Leitfähigkeit der QL-Stufen nur einen Maximalwert dar.

Lokal wurde in der STP-Messung wie in der STP-Messung für den 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film in Kapitel 5.3.3 vorrangig ein konstanter Gradient sowohl parallel als auch senkrecht zu den Stufenkanten gefunden. Gemäß den Aussagen in den Kapitel 2.2.2 und 4.4.3 resultiert der konstante Gradient wahrscheinlich aus der Streuung an Phononen als vorherrschender Streuprozess. Der Gradient zeigte in seiner Feinstruktur wie in Kapitel 5.3.3 beim 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film Spannungssprünge. Diesmal waren die signifikanten Spannungssprünge vor allem mit Domänengrenzen (DG) in der Topographie korreliert. Für die Spannungssprünge konnte ausgeschlossen werden, dass sie ein Artefakt der Tunnelstromregelung sind. Zudem konnte durch Umkehrung der Querspannung gezeigt werden, dass die Spannungssprünge aus dem Transportfeld stammen. Nach Kapitel 2.2.2 weisen die Spannungssprünge an den DG auf eine Elektronenstreuung an den DG hin. Wenn man bedenkt, dass schon eine morphologische Struktur wie eine Stufenkante auf einer TI-Oberfläche zu Streuung führt (vgl. Kapitel 4.4.3 und Kapitel 5.3.5), erscheint es plausibel, dass eine Domänengrenze ebenfalls einen Streuer für den Elektronentransport im TI-Film darstellt. Dies wurde bereits von Liu et al. [141] aufgrund von STS-Untersuchungen an DG in Bi_2Se_3 vermutet: Sie fanden eine energetische Verschiebung des Dirac-Punkts an der DG, die sogar teilweise

zu Bandlücken im TSS an der DG führt, d. h. es findet eine Veränderung der Topologie in Bi₂Se₃ an den DG statt. Daher stellen DG offenbar starke Transportbarrieren für Leitungselektronen im eigentlich metallischen TSS dar, wie man es in dieser Arbeit im lokalen Transport anhand der Spannungssprünge sieht.

Im Fall des Elektronenflusses parallel zur Stufenrichtung wurde ein Spannungssprung an den DG von etwa $\Delta V = (19 \pm 2) \mu\text{V}$ vorgefunden. Eine typische Domäne hat hier auf der Bi₂Se₃-Oberfläche eine Breite von etwa 100 nm (vgl. Bild 5.24 und Bild 5.25). Dies entspricht gemäß dem Domänengradienten von etwa $E_D = (9.7 \pm 0.1) \text{ V/cm}$ eine Spannungsdifferenz von etwa $97 \mu\text{V}$ entlang einer Domäne, d. h. der Spannungssprung an der DG macht etwa 20 % der Spannungsdifferenz entlang einer typischen Domäne aus. Damit ist die DG für den Gesamtelektronentransport lokal recht bedeutsam. Die Leitfähigkeit einer QL-Stufe beträgt $\sigma_{\text{St}} = n_{1\text{QL}} \cdot G_{\parallel} G_{\perp} / (G_{\parallel} - G_{\perp}) = (9400 \pm 1200) \text{ S/cm}$ nach Gleichung (5.11), bezogen auf die gesamte Filmdicke bzw. den Gesamtelektronentransport. Zusammen mit der für das Bild 5.24 geschätzten 2D-Stromdichte von etwa $j_{2\text{D}} = (80 \pm 12) \text{ mA/cm}$ ergibt sich ein zu erwartender Spannungssprung von $\Delta V = j_{2\text{D}} / \sigma_{\text{St}} = (8 \pm 3) \mu\text{V}$. Da allein im gemittelten Profil der Feinstruktur in Bild 5.24d das Rauschen in diesem Bereich liegt, ist es plausibel, dass man in der Feinstruktur keine klare Signatur von den Stufenkanten sehen kann.

Im Fall des Elektronenflusses senkrecht zur Stufenrichtung wurde ein Spannungssprung an den DG von etwa $\Delta V = (39 \pm 4) \mu\text{V}$ vorgefunden. Mit der typischen Domänenbreite von ungefähr 100 nm auf der Bi₂Se₃-Oberfläche und dem vorhandenen Domänengradient von $E_D = (18.0 \pm 0.3) \text{ V/cm}$ ergibt sich entlang einer Domäne eine Spannungsdifferenz von etwa $180 \mu\text{V}$. Damit entspricht der Spannungssprung an der DG wieder etwa 20 % der Spannungsdifferenz entlang einer typischen Domäne. Die DG hat also für den Elektronentransport einen signifikanten Einfluss. Da die Messung in Bild 5.25 gegenüber Bild 5.24 ein höheres Rauschen zeigt, sodass sogar die Spannungssprünge an den DG zum Teil nicht zu erkennen sind, ist auch ein entsprechender Einfluss der Stufenkanten auf das Transportfeld nicht zu erkennen. Analog zum Fall des parallelen Stromflusses kann man den Spannungssprung an einer 1 QL-Stufe mit der durch die quadratische 4PP-Messung bestimmten Stufenleitfähigkeit abschätzen. Diese beträgt bezogen auf das gesamte Filmvolumen $\sigma_{\text{St}} = (9400 \pm 1200) \text{ S/cm}$ nach Gleichung (5.11). Zusammen mit der für das Bild 5.25 geschätzten 2D-Stromdichte von $j_{2\text{D}} = (185 \pm 75) \text{ mA/cm}$ ergibt sich ein zu erwartender Spannungssprung von $\Delta V = j_{2\text{D}} / \sigma_{\text{St}} = (20 \pm 11) \mu\text{V}$. Dieser Wert liegt schon im Bereich des Rauschens für das gemittelte Profil der Feinstruktur in Bild 5.25d. Daher erscheint es plausibel, dass man in der Feinstruktur keine Signatur der QL-Stufen sieht.

Man hat sowohl bei der STP-Messung mit dem Stromfluss parallel als auch bei der STP-Messung senkrecht zu den Stufenkanten die merkwürdige Situation, dass lokal die Domänengrenzen den Elektronentransport dominieren, aber wegen ihrer isotropen Verteilung global für den Stromtransport nicht relevant zu sein scheinen. Umgekehrt treten die Stufenkanten lokal im Rahmen des Rauschens praktisch nicht in Erscheinung, bestimmen aber global durch ihre anisotrope Verteilung den Stromtransport bzw. die Anisotropie des Schichtleitwerts.

Man kann analog zu den 1 QL-Stufen in Kapitel 5.3.5 (siehe Gleichung (5.8)) eine Stufenleitfähigkeit der DG einführen:

$$\sigma_{\text{DG}} = \frac{j_{2\text{D}}}{\Delta V}. \quad (5.12)$$

Dabei wird die DG als Liniendefekt behandelt mit der Dimension Leitwert je Länge. Eine genauere Erläuterung hierzu findet sich in der Zusammenfassung in Kapitel 7 (vgl. dort Gleichung (7.1)). Für den Elektronentransport parallel zu den Stufenkanten ergibt sich mit $\Delta V = (19 \pm 2 \mu\text{V})$ und $j_{2\text{D}} = (80 \pm 12) \text{ mA/cm}$ eine Leitfähigkeit der DG von $\sigma_{\text{DG}} = (4200 \pm 1100) \text{ S/cm}$. Die Streuung an der DG könnte analog zu Kapitel 5.3.5 auch nur in Folge von Streuung im TSS geschehen, sodass man die Leitfähigkeit mit dem Faktor σ_s/G auf die Leitfähigkeit des TSS normieren müsste:

$$\sigma_{\text{DG},s} = \frac{\sigma_s}{G} \cdot \sigma_{\text{DG}} = \frac{\sigma_s \cdot E}{j_{2\text{D}}} \cdot \frac{j_{2\text{D}}}{\Delta V} = \sigma_s \cdot \frac{E}{\Delta V}. \quad (5.13)$$

Mit dem Gesamtgradienten von $E = (10.6 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ ergäbe sich dann eine Leitfähigkeit der DG im TSS von $\sigma_{\text{DG},s} = (330 \pm 150) \text{ S/cm}$.

Man kann nun analog zum Transportfall parallel zu den Stufen auch die Domänenleitfähigkeit beim Transportfall senkrecht zu den Stufen berechnen. Der Spannungssprung an den DG war im Mittel $\Delta V = (39 \pm 4) \mu\text{V}$. Aus Gleichung (5.12) folgt mit der 2D-Stromdichte $j_{2\text{D}} = (185 \pm 75) \text{ mA/cm}$ in Bild 5.25 und dem dortigen mittleren Gradienten $E = (19.8 \pm 0.3) \text{ V/cm}$ als Leitfähigkeit der DG ein Wert von $\sigma_{\text{DG}} = (4700 \pm 2400) \text{ mS/cm}$. Würde die Streuung nur im TSS stattfinden, wäre gemäß Gleichung (5.13) $\sigma_{\text{DG},s} = (300 \pm 140) \text{ mS/cm}$.

Insgesamt lässt sich folgendes Resümee ziehen: Für die DG in Bi_2Se_3 konnte im Rahmen der Messunsicherheit kein Unterschied der DG-Leitfähigkeit in Abhängigkeit der Stromrichtung parallel und senkrecht zu den Stufen gefunden werden. Im Mittel ergibt sich als Gesamtleitfähigkeit der DG ein Wert von 4500 S/cm und unter der Annahme, dass die Streuung an der DG nur im TSS stattfindet, ein Wert von 300 S/cm . Aus der quadratischen 4PP-Messung wurde eine Gesamtleitfähigkeit von QL-Stufen in dem hier vorliegenden Bi_2Se_3 -Film von $(9400 \pm 1200) \text{ S/cm}$ und bezogen auf den TSS von $(740 \pm 330) \text{ S/cm}$ ermittelt. Beide Werte liegen höher als die entsprechenden Werte für die DG. Daher ist in jedem Fall die Leitfähigkeit der DG gegenüber der Leitfähigkeit von Stufenkanten signifikant niedriger, d. h., DG stellen für den Elektronentransport in Bi_2Se_3 eine größere Transportbarriere dar, so wie man es bei Liu et al. [141] auch in Form der topologischen Veränderungen an den DG beobachtet hat. Daher würde eine anisotrope Verteilung der DG auch die Filmeigenschaften noch stärker beeinflussen, als dies durch die Stufenkanten geschieht. Die lokalen wie auch die globalen Leitungseigenschaften dünner Bi_2Se_3 -Filme hängen also sehr von der Verteilung vorhandener intrinsischer Oberflächendefekte wie Stufenkanten und insbesondere Domänengrenzen ab.

5.5 Bi-Inseln auf einer Bi₂Se₃-Oberfläche

Im folgenden Kapitel wird der Einfluss von zusätzlichen Bi-Inseln auf der Bi₂Se₃-Oberfläche für den Stromtransport untersucht. Dies geschah in Zusammenarbeit mit P. Graf während seiner Masterarbeit »Transportmessungen an topologischen Isolatoren und perkolierenden Silbernetzwerken« [142]. Die Ergebnisse wurden zudem zusammen mit C. A. Bobisch und R. Möller in Form eines Manuskripts [143] für die Veröffentlichung in einer Fachzeitschrift vorbereitet.

5.5.1 Präparation

Die Präparation wurde analog zur Präparation des 14.5 QL Bi₂Se₃-Film (Kapitel 5.3.1) durchgeführt: Auf der Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion (Bild 5.26a) wurde durch Bedampfen mit Bi und anschließendem Tempern auf 450 °C die α -Phase der Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Bi-Rekonstruktion gebildet (Bild 5.26b). Danach wurde gleichzeitig Se (Reinheit 99.999 %, Rate $> (870 \pm 20)$ pm/min) und Bi (Reinheit 99.997 %, Rate (540 ± 10) pm/min) für 13 min bei RT auf die Probe gemeinsam aufgedampft (Kammerdruck ca. 3×10^{-9} mbar). Dies entspricht gemäß Gleichung (3.5) einem Teilchenverhältnis Se:Bi von $> (2.11 \pm 0.04):1$, d. h., gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis (1.5:1) lag ein Überschuss an Se vor. Mit Gleichung (3.6) ergibt sich eine Schichtdicke des gewachsenen Bi₂Se₃-Films von (14.2 ± 0.3) nm. Dies entspricht (15 ± 0.3) QL mit 1 QL = 952 pm gemäß Tabelle 4.2 ($\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c). Die Schichtdicke liegt nach dem Quantenphasendiagramm von Bi₂Se₃ (Kapitel 4.4.2) weit über dem kritischen Wert von 6 QL für die TI-Phase, sodass eine reine 3D TI-Phase erwarten werden kann. Nachdem der Bi₂Se₃-Film ähnlich wie in Kapitel 5.3.1 für 120 min bei einer Probertemperatur von 280 °C getempert wurde, zeigte sich im LEED ein hexagonales Beugungsmuster (siehe Bild 5.26c) mit einem schwachen Beugungsring auf Höhe der Reflexe, der auf eine sehr leichte Polykristallinität des Film schließen lässt. Die analog zu Kapitel 5.1.1 aus den LEED-Aufnahmen ermittelte Gitterkonstante liegt mit (412 ± 8) pm im Bereich der Gitterkonstante von Bi₂Se₃ (Volumenwert 414 pm, siehe Tabelle 4.2). Unter dem STM (Bild 5.26e und Bild 5.26f) zeigt sich ein glatter Film, auf dem Stufen mit einer Höhe von QL zu finden sind (Literaturwert 952 pm).

Anschließend wurde die Probe mit Bi (Rate (50 ± 10) pm/min) bei RT für 30 s bedampft. Nominell entspricht dies einem (0.04 ± 0.01) nm dicken Bi-Film bzw. einer Belegung von etwa 10 % der Probenoberfläche mit Bilagen (BL) aus Bi (Höhe der BL 394 pm, vgl. Kapitel 4.1.2). Im LEED (Bild 5.26d) zeigt sich nur eine Schwächung der Reflexe, wobei der Beugungsring kaum noch zu sehen ist. Im STM waren etwa 10 % der Bi₂Se₃-Oberfläche mit Bi-Inseln bedeckt, die im Mittel eine Höhe im Bereich von etwa (600 ± 100) pm aufweisen. Diese Abweichung vom erwarteten Wert von 394 pm wurde auch in der Literatur für Bi-BL auf Bi₂Se₃ im STM beobachtet [144].

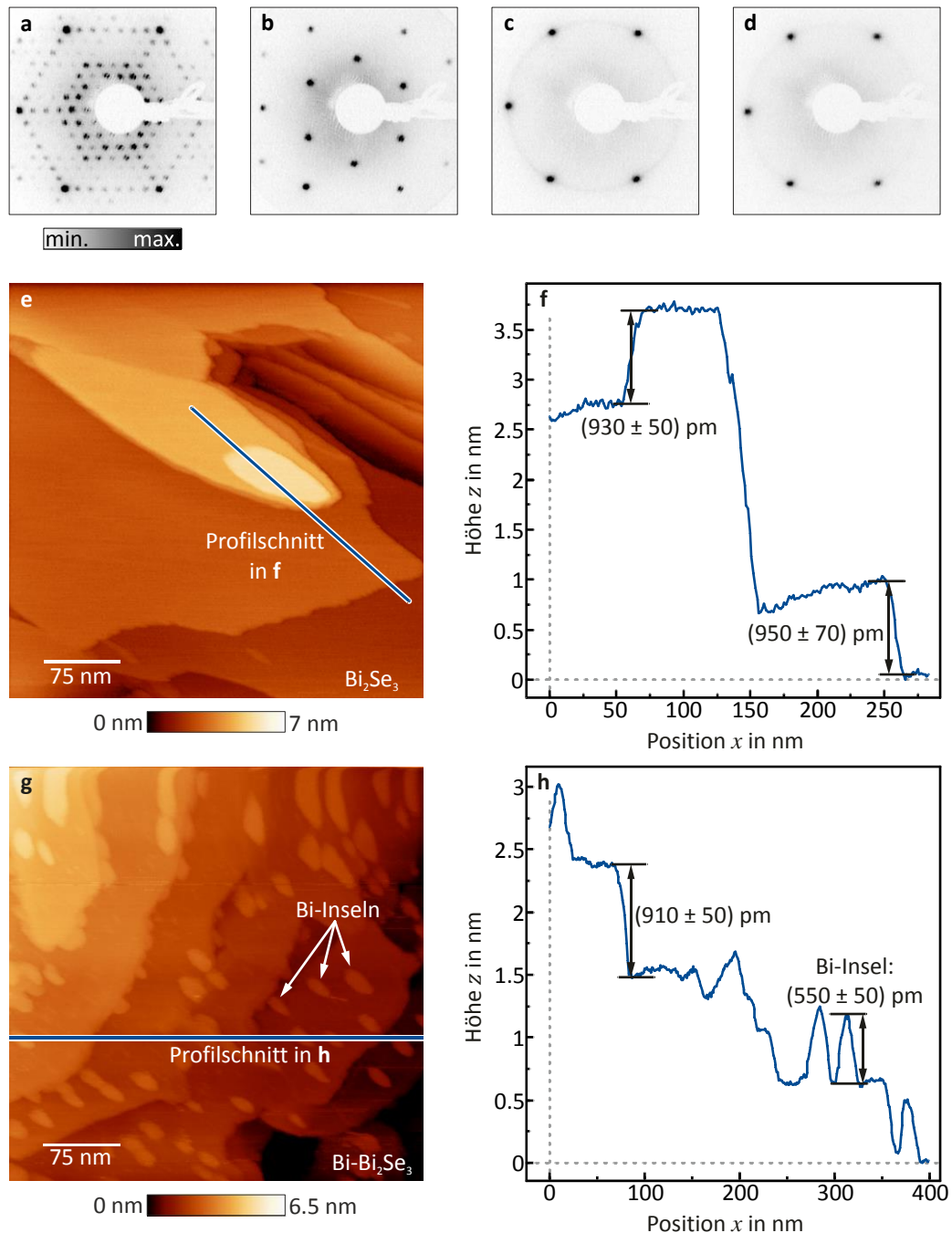


Bild 5.26 | Struktur des Systems Bi auf Bi₂Se₃. (a-c) LEED-Aufnahmen der Präparationsschritte für die Probe (Elektronenenergie 35 eV): (a) Si(111)-(7×7)-Rekonstruktion. (b) α-Phase der $\sqrt{3}\text{Bi}$ -Rekonstruktion auf Si(111). (c) 15 QL Bi₂Se₃-Film nach dem Tempern. (d) 15 QL Bi₂Se₃-Film nach dem Bedampfen mit Bi. (e-h) STM-Aufnahmen und zugehörige Profile (gemittelt über 4 Scanzeilen) des reinen Bi₂Se₃-Films (e und f; $V_t = 0.3$ V, $I_t = 8$ pA, 400×400 nm²) und des mit Bi bedampften Bi₂Se₃-Films (g und h; $V_t = 4$ mV_{pp} mit 1.6 kHz, $I_t = 8$ pA, 400×400 nm²). Alle Aufnahmen sind bei RT durchgeführt worden. Darstellung nach [143].

5.5.2 2PP-Messung

Wie bei den vorherigen Proben wurde zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften eine 2PP-Messung durchgeführt. Da der Bi₂Se₃-Film im Vergleich mit dem schwach leitenden Si-Substrat (7.7 mS/cm) für den Elektronentransport den vorrangigen Transportkanal bildet, wird im Folgenden wie bei Kapitel 5.2.2 nur der Fall einer Schichtleitung betrachtet. In Bild 5.27 ist die 2PP-Messung für die reine Bi₂Se₃-Oberfläche sowie für die Bi₂Se₃-Oberfläche nach dem Bedampfen mit Bi gezeigt (nachfolgend kurz Bi/Bi₂Se₃ genannt). Mittels zweier Kontaktspitzen aus Gold wurde für verschiedene Spitzenabstände (siehe Bild 5.27b) der Widerstand auf den jeweiligen Oberflächen ermittelt (vgl. auch Bild 9.10 und Bild 9.11 in Kapitel 9.2.1)). Bild 5.20a zeigt die Auftragung des jeweils ermittelten Widerstands R zwischen den Spitzen gegen den Spitzenabstand d . Für die reine Bi₂Se₃-Oberfläche wurden für Spitzenabstände von 30–1070 μm Widerstände im Bereich von 640–1620 Ω ermittelt. Für die Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche wurden für Spitzenabstände von 40–1500 μm Widerstände im Bereich von 700–1110 Ω ermittelt. In beiden Fällen streuen die Messwerte recht stark, aber insgesamt nimmt der Widerstand mit zunehmendem Spitzenabstand zu, wie man es für eine Schichtleitung gemäß Kapitel 2.3.3 erwartet. Zudem unterscheiden sich die Widerstandsverläufe für die Bi₂Se₃ und Bi/Bi₂Se₃ stark voneinander. Der an beide Widerstandsverläufe angepasste Fit (Gleichung (2.49)) für die Schichtleitung gibt die Tendenz der Messkurven wieder. Für die reine Bi₂Se₃-Oberfläche wurde ein Schichtleitwert von $G_{2PP, \text{Bi}_2\text{Se}_3} = (1.4 \pm 0.8) \text{ mS}$ mit einem mittleren Kontaktradius der Kontaktspitzen von $r_k = (2.2 \pm 1.3) \mu\text{m}$ ermittelt. Nach dem Bedampfen mit Bi zeigt der Fit für die Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche eine höhere Leitfähigkeit von $G_{2PP, \text{Bi/Bi}_2\text{Se}_3} = (3.9 \pm 1.5) \text{ mS}$, wobei sich ein mittlerer Kontaktradius der Kontaktspitzen von $r_k = (0.013 \pm 0.02) \mu\text{m}$ ergab.

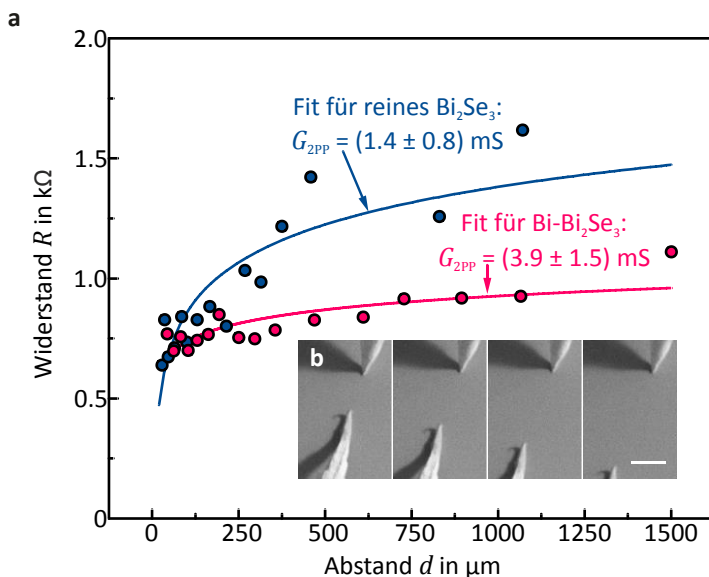


Bild 5.27 | 2PP-Messung auf reinem Bi₂Se₃ und Bi/Bi₂Se₃.

(a) Auftragung des Widerstands R gegen den Abstand d der Kontaktspitzen auf reinem Bi₂Se₃ und Bi/Bi₂Se₃ bei RT. An die Messpunkte wurde der Fall einer Schichtleitung angefitet. (b) 2PP-Messung, beobachtet mit dem SEM. Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von 40 μm . Bild aus [143].

5.5.3 STP-Messung

In Bild 5.28 ist eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie gezeigt, die für die STP-Messung der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche benutzt wurde. Als Abstand der Kontaktspitzen wurde $d = (85 \pm 20) \mu\text{m}$ gewählt. Da die Tunnelspitze mittig zwischen die Kontaktpunkte der Kontaktspitzen gesetzt wurde, kann der Betrag der 2D-Stromdichte nach Gleichung (5.3) mit $j_{2D} = 2I_{\text{quer}}/(\pi d)$ abgeschätzt werden.

In Bild 5.29 sind die Ergebnisse der STP-Messung dargestellt. In Bild 5.29a ist die Topographie und in Bild 5.29b das zugehörige elektrochemische Potential (nachfolgend kurz Potential genannt) auf der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche gezeigt, wobei sich die 2D-Stromdichte in der STP-Messung mit $j_{2D} = (110 \pm 30) \text{ mA/cm}$ abgeschätzt wurde. Im oberen Bildbereich der STP-Messung zeigt sich eine leichte Bildverzerrung in Form einer Drift. Im Potential ist vornehmlich ein konstanter Gradient in Richtung des Stromtransportes (schnelle Scanrichtung) zu sehen. Neben diesem prominenten Merkmal zeigen sich Potentialmulden gegenüber dem mittleren Gradienten, die mit der Position von Bi-Inseln auf der Oberfläche korreliert sind.

In Bild 5.29c und Bild 5.29d sind Profile der Topographie und des Potentials entlang zweier Bi-Inseln gezeigt. In der Topographie zeigen die Bi-Inseln die Höhe einer BL auf Bi₂Se₃ [144]. Im Potential sind an der Position der Inseln Potentialmulden zu sehen, die eine Tiefe gegenüber dem mittleren Gradientenverlauf von etwa $(130 \pm 30) \mu\text{V}$ aufweisen. Die Form der Potentialmulde ist praktisch unabhängig von der Scanrichtung (siehe Bild 5.29d) und daher nicht durch ein Regelartefakt oder Ähnliches hervorgerufen. In Bild 5.29e und Bild 5.29f sind die Topographie und das Potential einer weiteren STP-Messung gezeigt, bei der in der Bildmitte die Querspannung und damit lokal der Elektronenfluss umgekehrt wurde. Die Messung ist gegenüber der ersten recht stark verrauscht und zeigt eine starke Drift im Bild. Dennoch sieht man, dass sich die Richtung der Potentialmulden gegenüber dem mittleren Gradienten nicht umkehrt. Der Gradient selbst kehrt seine Richtung um. Gemäß Kapitel 2.2.3 handelt es sich daher wahrscheinlich um Thermospannungssignale an der Position der Bi-Inseln.

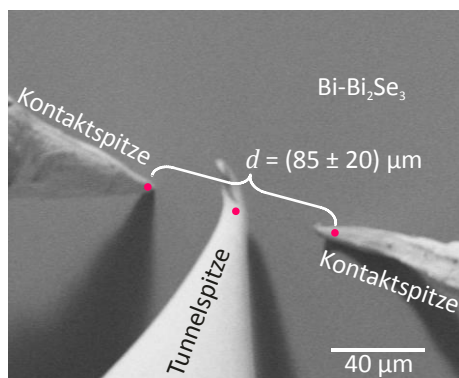


Bild 5.28 | STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung bei RT auf der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche. Bild aus [143].

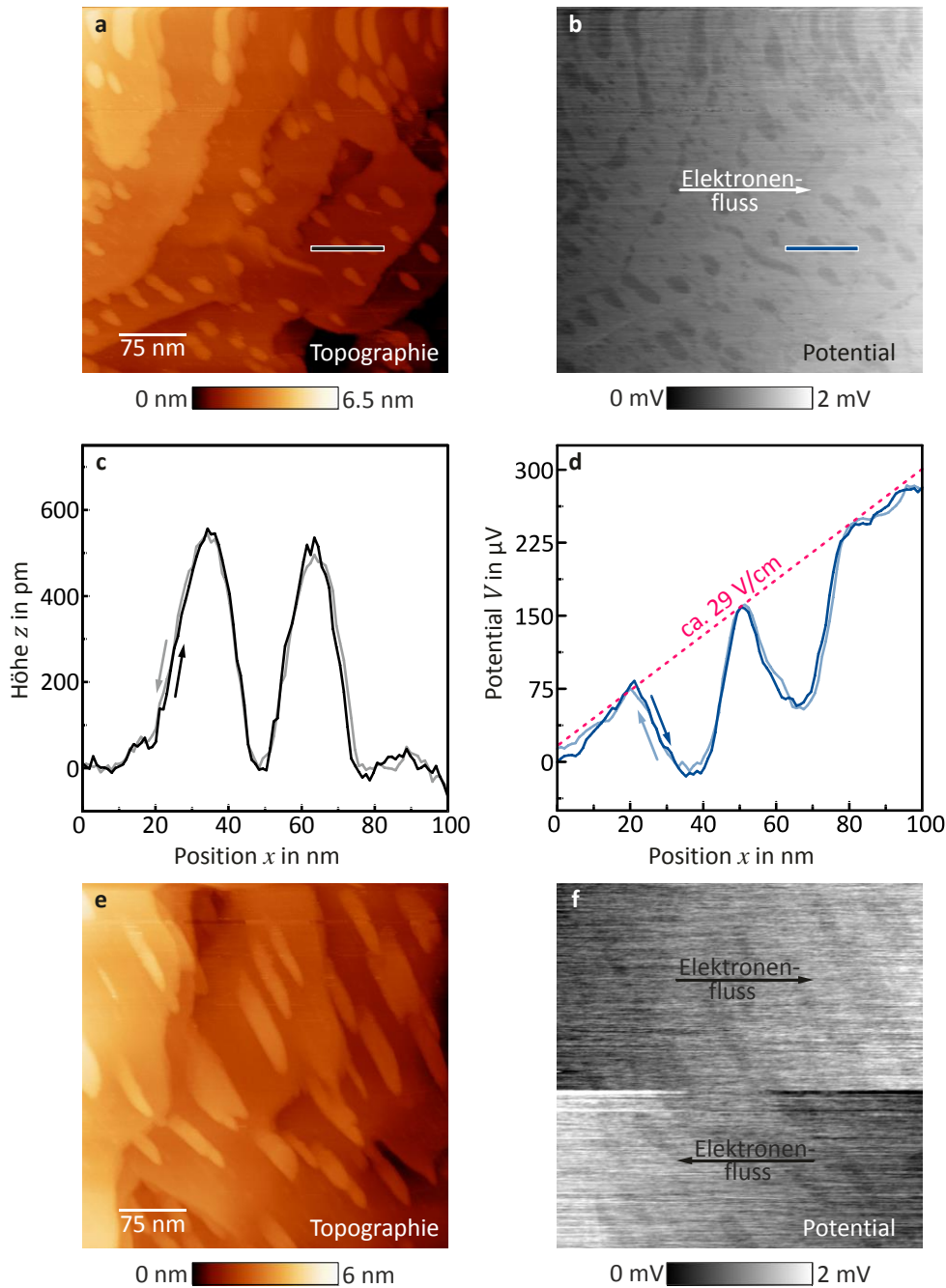


Bild 5.29 | STP-Messung auf der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche. (a-d) STP-Messung mit $V_{\text{mod}} = 4 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 1.6 kHz, $I_t = 8 \text{ pA}$, $400 \times 400 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = +0.87 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +1.49 \text{ mA}$ bei RT. (a) Topographie der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche. (b) Potential auf der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche. (c) und (d) Profile (gemittelt über 4 Scanzeilen) durch die Topographie und das Potential entlang zweier Bi-Inseln (siehe Linie in a und b). In blässerer Farbe ist die jeweilige Rückrichtung des Scans gezeigt (Scanrichtung ist mit Pfeil gekennzeichnet). (e und f) Weitere STP-Messung auf der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche mit Umkehrung der Querspannung bzw. des Elektronflusses. Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 4 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 1.6 kHz, $I_t = 8 \text{ pA}$, $400 \times 400 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = \pm 1.00 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = \pm 1.36 \text{ mA}$. Darstellung ähnlich zu [143].

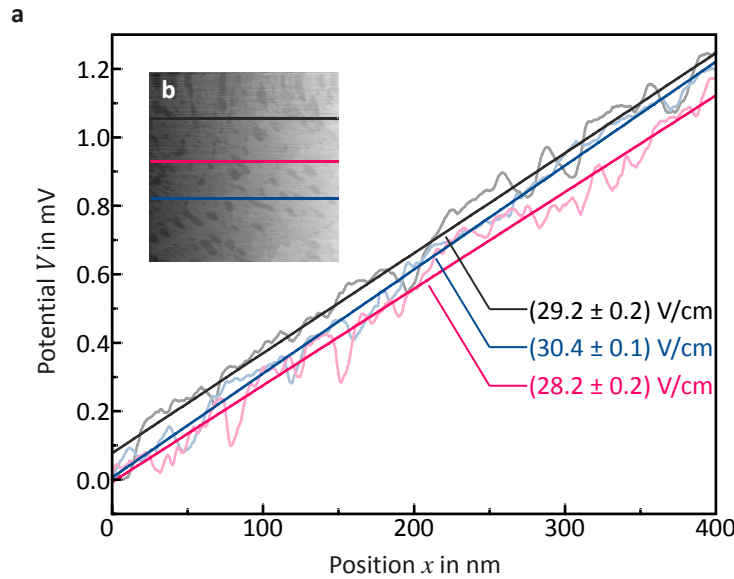


Bild 5.30 | Gradientenbestimmung für das Potential in Bild 5.29b. (a) Auftragung des Potentials V über die Position x für drei Profile (blassere Profillinien, gemittelt über 4 Scanzeilen) im Potential aus Bild 5.29b sowie die an die Profillinien angepassten linearen Fits mit Angabe ihrer Steigung. (b) Lage der drei Profile in Bild 5.29b. Bild aus [143].

An einigen Stellen sind augenscheinlich auch Spannungssprünge an Stufenkanten zu erkennen, die in Kapitel 5.3.3 bzw. 5.4.4 auch auf der reinen Bi_2Se_3 Oberfläche gefunden wurden. Leider konnte im Rahmen des Messrauschens und durch die Strukturierung des Potentials mit den Mulden an der Position der Bi-Inseln kein geeigneter Abzug des Gradienten durchgeführt werden, anhand dessen man eine Stufung des Potentials gut erkennen kann.

In Bild 5.30a sind Profile durch das Potential in Bild 5.29b an drei Stellen (Bild 5.30b) gezeigt. An die Profile wurde jeweils ein linearer Fit angepasst. Die mittlere Steigung der Fits entspricht einem Gradienten auf der Oberfläche von $E = (29.3 \pm 0.2) \text{ V/cm}$. Mit der Stromdichte $j_{2D} = (110 \pm 30) \text{ mA/cm}$ ergibt sich für den $\text{Bi/Bi}_2\text{Se}_3$ -Film ein Leitwert von $G_{\text{STP}} = j_{2D}/E = (3.8 \pm 0.7) \text{ mS}$.

5.5.4 Diskussion

Für den mit Bi-Inseln belegten Bi_2Se_3 -Film ergibt sich aus der 2PP-Messung ein globaler Schichtleitwert (μm -Skala) von $G_{2\text{PP,Bi/Bi}_2\text{Se}_3} = (3.9 \pm 1.5) \text{ mS}$. Der lokale Schichtleitwert (nm-Skala) wurde zu $G_{\text{STP}} = (3.8 \pm 0.7) \text{ mS}$ in der STP-Messung ermittelt und stimmt in Rahmen seiner Grenzen mit dem globalen Schichtleitwert sehr gut überein. Mittels der 2PP-Messung konnte zuvor auch für die reine Bi_2Se_3 -Oberfläche ein Leitwert von $G_{2\text{PP,Bi}_2\text{Se}_3} = (1.4 \pm 0.8) \text{ mS}$ bestimmt werden, d.h. durch die Bedampfung der Oberfläche mit Bi fand eine im Rahmen der Messfehler unterscheidbare, deutliche Erhöhung der Leitfähigkeit des Films um etwa den Faktor 3 statt. Eigentlich hatte man erwartet, dass sich analog zu dünnen ($< 50 \text{ nm}$) $\text{Bi}(111)$ -Filmen auf $\text{Si}(001)$, deren Stromtransport durch den Oberflächenzustand in Bi dominiert wird, zusätzliche Bi-Inseln wie Streuer für den TSS in Bi_2Se_3 wirken [145]. Eine mögliche Erklärung findet sich in einer Stu-

die von Chen et al. [146], die das ähnliche System Bi/Bi₂Te₃ untersucht haben: Dort bewirkt das zusätzliche Bi auf der Bi₂Te₃-Oberfläche nahezu eine Verdoppelung der Ladungsträgerkonzentration im Bi₂Te₃-Film und damit eine entsprechende Erhöhung des Filmleitwerts. Gemäß [147] entwickeln sich durch das Aufbringen von zusätzlichen Bi-BL auf der Bi₂Te₃-Oberfläche Zustände an der Grenzfläche Bi/Bi₂Te₃, die die Ladungsträgerkonzentration im Bi₂Te₃-Film erhöhen. Für das System Bi/Bi₂Se₃ wird von einem ähnlichen Ladungstransfer in den Bi₂Se₃-Film berichtet [144], wie die hier beobachtete Leitwerterhöhung es auch nahelegt.

In der STP-Messung wurde lokal vorrangig ein konstanter Gradient gefunden, der sehr wahrscheinlich nach Kapitel 2.2.2 aus der Streuung an Phononen als vorherrschender Streuprozess resultiert. Dies ist ganz analog zu reinem Bi₂Se₃ in der topologischen Phase (siehe hierzu [138], [139], Kapitel 4.4.3, sowie Kapitel 5.3 und Kapitel 5.4).

Zusätzlich zum konstanten Gradienten wurden im Potentialverlauf Thermospannungssignale an der Position der Bi-Inseln gefunden. Da für solche Signale ein Temperaturunterschied ΔT zwischen Spitze und Probe erforderlich ist, wird analog zu Gleichung (5.6) eine untere Schwelle für ΔT geschätzt, die alleine auf Grund der in die Probe eingebrachten elektrischen Leistung entsteht. Andere inharänte Prozesse können in der Messanlage zu einer weiteren, deutlich höheren Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe führen. Für die STP-Messung in Bild 5.29b wurde eine Querspannung von $V_{\text{quer}} = 0.87 \text{ V}$ und ein Querstrom von $I_{\text{quer}} = 1.49 \text{ mA}$ verwendet, d. h., in die Probe wurde eine elektrische Leistung von $P = 1.3 \text{ mW}$ eingebracht. Die benutzte Probe hat die Maße $12 \times 2 \times 0.4 \text{ mm}^3$. Für die Abschätzung soll die elektrische Leistung in die Fläche $A = 2 \times 0.4 \text{ mm}^2$ in der Mitte der Probe in Wärme umgewandelt werden und von dort aus über Wärmeleitung im Si-Substrat ($\kappa = 1.48 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63]) an die Stirnflächen der Probe in $d = 6 \text{ mm}$ Entfernung abgeleitet werden. Mit Gleichung (5.6) ergibt sich eine Temperaturdifferenz von $\Delta T = P/2 \cdot d/(A \cdot \kappa) = 0.03 \text{ }^\circ\text{C}$. Diese Temperaturdifferenz ist gegenüber Kapitel 5.2.4 ($0.07 \text{ }^\circ\text{C}$) nochmals deutlich kleiner. Jedoch ist der Wert nur als untere Grenze zu sehen. Entgegen der Abschätzung wird die elektrische Leistung in einem deutlich kleineren Bereich zwischen den Kontaktspitzen dissipiert (Abstand der Spitzen ca. $85 \text{ }\mu\text{m}$). Zudem leitet Bi₂Se₃ die Wärme schlechter, sodass an der Bi/Bi₂Se₃-Oberfläche die Temperatur noch einmal erhöht sein sollte. In Kapitel 5.2.4 war zudem die eingebrachte Leistung um den Faktor 5 und der Abstand der Kontaktspitzen um den Faktor 20 größer, während die Schichtdicke des Bi₂Se₃-Films nur etwa $\frac{1}{3}$ des hier hergestellten Bi₂Se₃-Films beträgt. Insgesamt bedeutet dies sogar, dass die eigentliche Temperaturdifferenz an der Probenoberfläche hier wahrscheinlich deutlich höher ist als in Kapitel 5.2.4.

Gemäß Gleichung (2.41) wird die Höhe der Thermospannung V_{th} neben der Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe auch von der Variation der normierten Ableitung der Proben-LDOS $D_{\text{p}}(E)$ am mittleren chemischen Potential μ zwischen Spitze und Probe bestimmt: $V_{\text{th}} \sim D'_{\text{p}}(\mu)/D_{\text{p}}(\mu)$. Da bei dem vor-

liegenden Bi/Bi₂Se₃-Film die Thermospannung auf den Bi-Inseln auftrat, müssen diese eine LDOS mit einem gegenüber der reinen Bi₂Se₃-Oberfläche anderen Verhältnis $D'_p(\mu)/D_p(\mu)$ aufweisen. F. Yang et al. [148] konnten für das System Bi/Bi₂Te₃ mittels STS-Messungen zeigen, dass für verschiedene Tunnelspannungen die LDOS auf dem Bi-BL sich von der LDOS auf der reinen Bi₂Te₃-Oberfläche unterscheidet. Aus STS-Messungen wird in [148] außerdem ersichtlich, dass es am Rand einer Bi-BL auf der Bi₂Te₃-Oberfläche auch zu einer LDOS-Oszillation in Folge von Streuung an der Bi-BL-Kante kommt. Für Bi/Bi₂Se₃ stehen solche STS-Messungen – meiner Kenntnis nach – leider in der Literatur noch nicht zur Verfügung. Da jedoch die Systeme Bi/Bi₂Se₃ und Bi/Bi₂Te₃ einander recht stark ähneln, scheint es auch für Bi/Bi₂Se₃ plausibel, dass sich $D'_p(\mu)/D_p(\mu)$ der Bi-Inseln und des reinen Bi₂Se₃ voneinander unterscheidet und daher zu einer unterschiedlichen starken Thermospannung im STM führen, so wie es die hier beobachteten Signale an der Position der Bi-Inseln nahelegen.

In der Gesamtbetrachtung hat man die merkwürdige Situation, dass einerseits die Bi-Inseln gemäß [148] auch wahrscheinlich als lokale Streuer auf der Bi₂Se₃ wirken, aber dieser Effekt durch die Erhöhung der Ladungsträgerkonzentration von Seiten der Bi/Bi₂Se₃-Grenzfläche überkompensiert wird und dass sich insgesamt die Leitfähigkeit des Bi₂Se₃-Films nach Bedampfung mit Bi sogar erhöht.

6 Studien an Bismuttellurid

Bi_2Te_3 weist als Schwestersystem große Ähnlichkeiten zu Bi_2Se_3 auf, jedoch bildet es einen topologischen Oberflächenzustand aus, der im Vergleich zu Bi_2Se_3 mehr Streuung zulässt (vgl. Kapitel 4.3.3). Daher wurde es im Rahmen dieser Arbeit als zweites System mittels Mehrpunkt- und STP-Messungen untersucht. Die Messungen wurden in Zusammenarbeit mit M. Soleimani und S. Hoepken im Rahmen ihrer Masterarbeiten »Präparation und strukturelle Analyse dünner Bi_2Te_3 -Proben« (M. Soleimani, [149]) und »Elektrischer Transport in Bi_2Te_3 auf mikroskopischer Skala« (S. Hoepken, [150]) durchgeführt. Alle Messungen wurden, wenn nicht anders vermerkt, bei Raumtemperatur (RT) durchgeführt.

6.1 Bi_2Te_3 -Film mit einer Schichtdicke von 14 QL

Ähnlich wie in Kapitel 5.3 wird nachfolgend eine Studie eines 14 QL dicken Bi_2Te_3 -Films gezeigt. Die gewählte Schichtdicke liegt gemäß Kapitel 4.4.2 weit über dem kritischen Wert von ca. 2 QL für eine hybridisierte TI-Phase in Bi_2Te_3 , d. h., der 14 QL Bi_2Te_3 -Film sollte sich wie beim 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film in Kapitel 5.3 in der Phase eines reinen 3D TI befinden.

6.1.1 Präparation

Die Präparation wurde wie bei Krumrain et al. [73] durchgeführt (vgl. auch Kapitel 4.2): Auf eine reine $\text{Si}(111)-(7\times 7)$ -Rekonstruktion (Bild 6.1a, gleiches, gestuftes Si-Substrat wie in Kapitel 5.1.1) wurde gleichzeitig auf die Probe Te (Reinheit 99.999 %, Rate (3900 ± 200) pm/min) und Bi (Reinheit 99.997 %, Rate (390 ± 10) pm/min) bei einer Probertemperatur von 250 °C für 15 min gemeinsam aufgedampft (Kammerdruck ca. 5×10^{-8} mbar). Dies entspricht gemäß Gleichung (3.5) einem Teilchenverhältnis $\text{Te}:\text{Bi}$ von $(10.5 \pm 0.8):1$, d. h., gegenüber dem stöchiometrischen Verhältnis (1.5:1) lag ein Überschuss an Te vor. Mit Gleichung (3.6) ergibt sich eine Schichtdicke des gewachsenen Bi_2Te_3 -Films von (14.1 ± 0.4) nm bzw. (13.9 ± 0.4) QL mit $1 \text{ QL} = 1019 \text{ pm}$ gemäß Tabelle 4.2 ($\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c). Diese Schichtdicke liegt nach Kapitel 4.4.2 weit über dem kritischen Wert von ca. 2 QL für eine hybridisierte TI-Phase in Bi_2Te_3 , d. h., der Bi_2Te_3 -Film sollte vollständig in der reinen 3D TI-Phase liegen. In Bild 6.1b ist ein LEED-Bild des Bi_2Se_3 -Films nach der Präparation ohne weiteres Tempern zu sehen, das ein scharfes hexagonales Beugungsmuster zeigt. Dies impliziert einen kristallinen und geschlossenen Film, wobei sich analog zu Kapitel 5.1.1 mittels der $\text{Si}(111)-(1\times 1)$ -Reflexe in Bild 5.5a eine Gitterkonstante von (432 ± 9) pm ergibt (Volumenwert 438 pm, vgl. Tabelle 4.2).

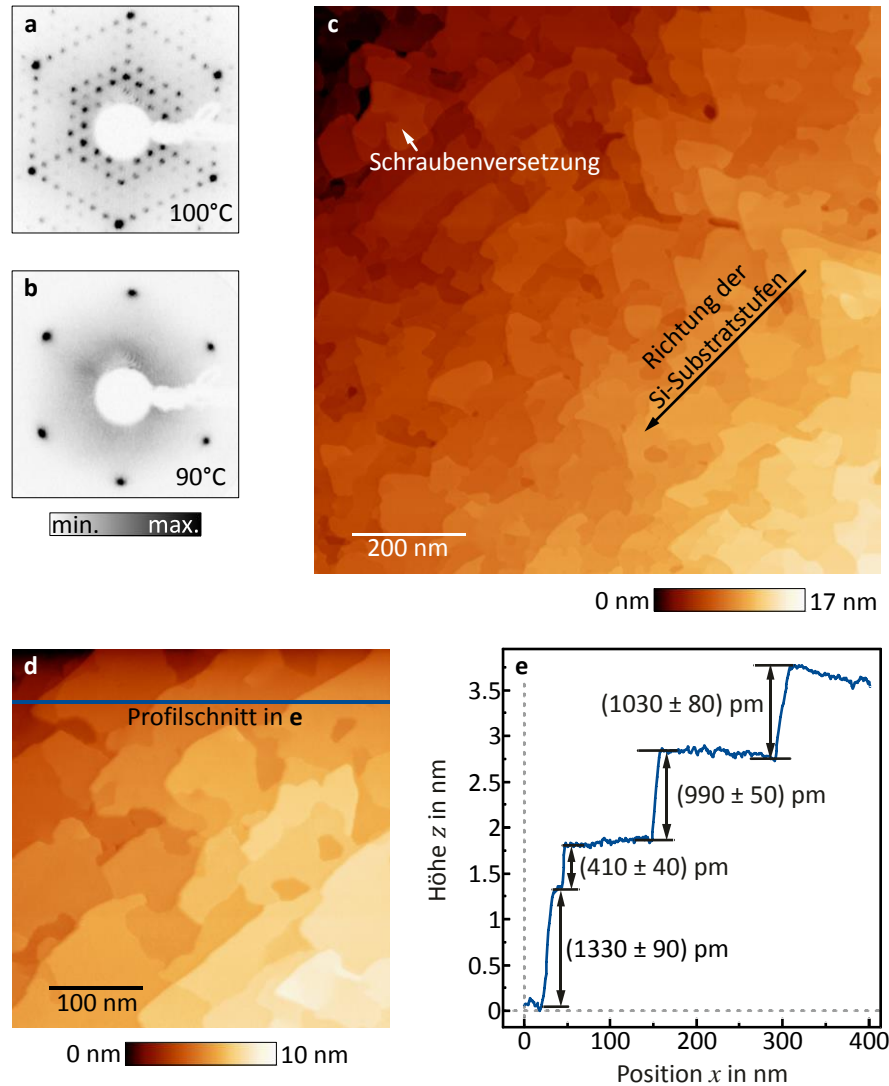


Bild 6.1 | Struktur des 14 QL Bi_2Te_3 -Films. LEED-Aufnahmen der Probenpräparation (Elektronenenergie 35 eV, Probentemperatur im jeweiligen LEED-Bild): (a) Substrat (Si(111)-(7×7)) vor dem Bedampfen mit Bi und Te. (b) Präparierter Bi_2Te_3 -Film. (c-e) STM-Studie des hergestellten Bi_2Te_3 -Films ($V_t = 0.3$ V, $I_t = 10$ pA, Messung bei RT). Dabei zeigt c eine Übersichtsaufnahme ($1 \times 1 \mu\text{m}^2$) und d einen Ausschnitt ($0.4 \times 0.4 \mu\text{m}^2$) der Bi_2Te_3 -Oberfläche. In e ist ein Profil (gemittelt über 7 Scanzeilen) entlang der in d eingezeichneten Linie gezeigt.

Auch unter dem STM (Bild 6.1c) erscheint der Film gestuft wie das zugrunde liegende Substrat. Die Fehlneigung senkrecht zur Stufung beträgt $(0.55 \pm 0.03)^\circ$ und liegt damit nahe an dem mittleren Wert des Si-Substrats (0.5° , siehe auch Kapitel 4.2.1). Neben der Stufung zeigen sich auf dem Film auch Schraubenversetzungen (siehe Pfeil in Bild 6.1c) sowie überwachsene Stufen. In Bild 6.1e ist ein Profil der Bi_2Te_3 -Oberfläche aus Bild 6.1d gezeigt. Zwei Stufen im Profil haben in etwa die Höhe von QL in Bi_2Se_3 (1019 pm). Es finden sich auf der Probe auch andere Stufenhöhen (in Bild 6.1e z. B. 1330 pm und 410 pm), die wahrscheinlich im Rahmen des Wachstums des Bi_2Te_3 -Films durch Si-Stufen (Einzelstufenhöhe 313 pm) verursacht werden [151].

6.1.2 2PP-Messung

Wie bei den Bi₂Se₃-Proben wurde zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften eine 2PP-Messung durchgeführt. Da der Bi₂Te₃-Film im Vergleich mit dem schwach leitenden Si-Substrat (7.7 mS/cm) für den Elektronentransport sehr wahrscheinlich wie bei den Bi₂Se₃-Filmen den vorrangigen Transportkanal bildet, wird im Folgenden nur der Fall einer Schichtleitung betrachtet (vgl. Kapitel 5). Bild 6.2 zeigt die 2PP-Messung auf der Bi₂Te₃-Oberfläche für zwei verschiedene Messpositionen in der Mitte der Probe. Mittels zweier Kontaktspitzen aus Gold wurde für verschiedene Spitzenabstände d (vgl. Bild 5.27a,) der Widerstand R aus der Steigung der linearen I - V -Kennlinien zwischen den Spitzen ermittelt (vgl. Bild 9.12 und Bild 9.13 in Kapitel 9.3.2). In Bild 5.20b ist die SEM-Aufnahmereihe einer 2PP-Messung gezeigt. Für die Position 1 auf der Bi₂Te₃-Oberfläche wurden für Spitzenabstände von 60-775 μm Widerstände im Bereich von 1400-2180 Ω ermittelt. Für die Position 2 fielen die Widerstandswerte mit 750-1450 Ω für einen Abstandsbereich von 25-870 μm niedriger aus. In jedem Fall erhöht sich der Widerstand R mit zunehmenden Abstand d der Spitzen, wie man es für eine Schichtleitung erwartet. An beide Widerstandsverläufe wurde Gleichung (2.49) angefitet. Die Messdaten werden durch die Fitkurve gut wiedergegeben, d. h., die Abweichungen der Messpunkte von der Fitkurve sind recht gering. Für Position 1 ergibt sich aus dem Fit ein Schichtleitwert von etwa $G_{2PP} = (1.2 \pm 0.2) \text{ mS}$ mit einem Kontaktradius von $r_k = (260 \pm 100) \text{ nm}$. Für Position 2 ergibt sich ein Schichtleitwert von etwa $G_{2PP} = (1.5 \pm 0.4) \text{ mS}$ mit einem Kontaktradius von $r_k = (750 \pm 420) \text{ nm}$. Im Rahmen ihrer Fehler überlappen sich die Leitwerte von Position 1 und Position 2 zwar, dennoch scheint die Probe insgesamt nicht ganz homogen hinsichtlich ihrer Leitungseigenschaften zu sein.

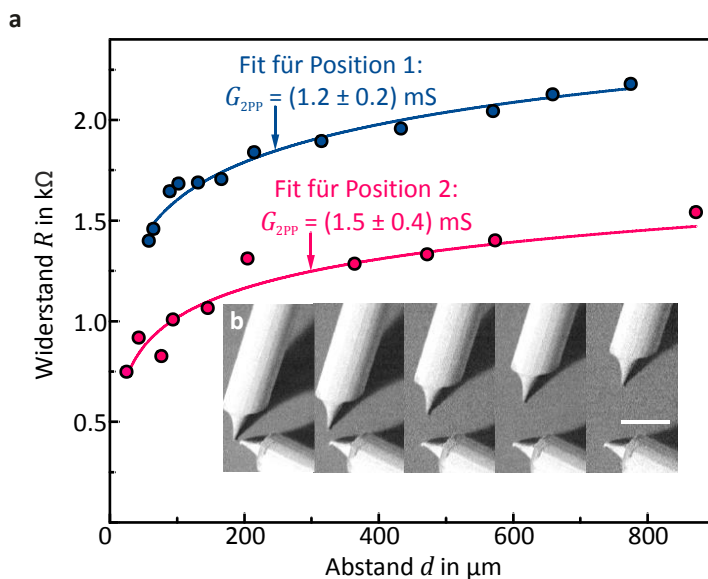


Bild 6.2 | 2PP-Messung auf dem 14 QL Bi₂Te₃-Film.

(a) Auftragung des Widerstand R gegen den Abstand d der Kontaktspitzen auf zwei Positionen bei RT in der Probenmitte. An die Messpunkte wurde der Fall einer Schichtleitung angepasst. (b) Mit dem SEM beobachtete 2PP-Messung, wobei der weiße Balken eine Länge von 150 μm repräsentiert. Bild ähnlich zu [150].

6.1.3 4PP-Messung

Analog zu den vorhergehenden 2PP-Messungen wurden außerhalb der Probenmitte weitere Messreihen in Form von 4PP-Messungen auf dem Bi_2Te_3 -Film durchgeführt. Bild 6.3a und Bild 6.3b zeigen eine abstandsabhängige 4PP-Messung auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche. Hierfür wurde eine lineare 4PP-Messung mit dem Spitzenabstand $a = (150 \pm 10) \mu\text{m}$ gewählt. Dann wurde die Position einer der stromführenden Spitzen in Richtung der linearen 4PP-Messung variiert (Strecke s in Bild 6.3b) und jeweils der Vierpunkt-widerstand V/I gemessen (vgl. auch Bild 9.14 in Kapitel 9.3.2). Die Auftragung von V/I ($82\text{--}153 \Omega$) über die Strecke s ($49\text{--}323 \mu\text{m}$) ergibt die abstandsabhängige Widerstandsmessung (Bild 6.3a). An die Messpunkte wurde mit Gleichung (2.54) der Fall einer Schichtleitung angepasst. Die Fitkurve gibt den Verlauf der Messdaten gut wieder, wobei ein Schichtleitwert von etwa $G_{4\text{PP}} = (2.2 \pm 0.3) \text{ mS}$ bestimmt wurde.

Im gleichen Probenbereich wurden zudem mehrere klassische lineare 4PP-Messungen mit unterschiedlich großen Spitzenabständen a ($37\text{--}226 \mu\text{m}$) durchgeführt (siehe Bild 6.4a und Bild 6.4b sowie Bild 9.15 in Kapitel 9.3.2). Gemäß Gleichung (2.51) sollte der Vierpunkt-widerstand V/I im Fall einer Schichtleitung nahezu konstant bleiben, wie man es in der Auftragung von V/I über a in Bild 6.4a auch sieht. Dabei weisen die Vierpunkt-widerstände eine gewisse Streuung von $87\text{--}120 \Omega$ auf, die nach Gleichung (2.51) einem Leitwert von $1.8\text{--}2.6 \text{ mS}$ entspricht. Dies könnte ein weiterer Hinweis auf eine lokale inhomogene Verteilung der Leitungseigenschaften sein. Mit $G_{4\text{PP}} = (2.3 \pm 0.5) \text{ mS}$ liegt der Mittelwert des Leitwerts der linearen 4PP-Messungen nahe dem zuvor durch die abstandsabhängige 4PP-Messung ermittelten Wert von $(2.2 \pm 0.3) \text{ mS}$.

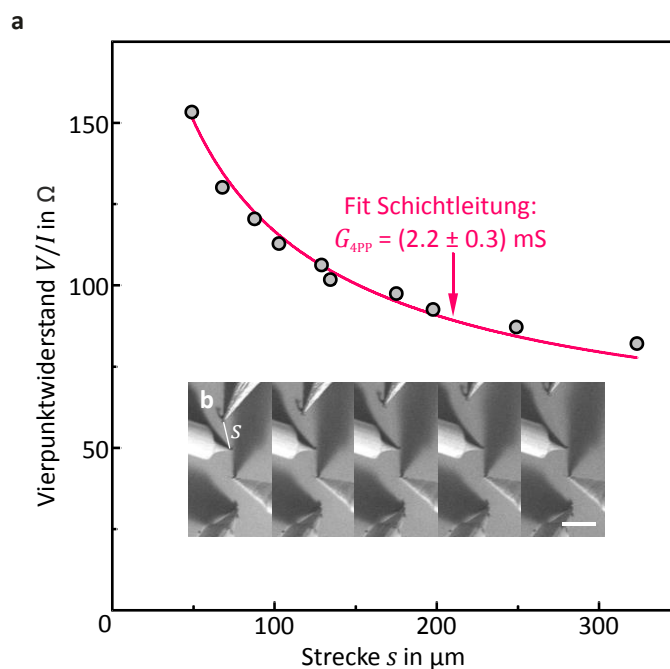


Bild 6.3| Abstandsabhängige 4PP-Messung auf dem 14 QL dicken Bi_2Te_3 -Film. Messung an anderen Stelle als bei Bild 6.2. (a) Auftragung des Vierpunkt-widerstands V/I über den Betrag der variierten Strecke s . Abstand der anderen Spitzen zueinander $a = (150 \pm 20) \mu\text{m}$. (b) SEM-Aufnahmen der Messung (weißer Balken entspricht $150 \mu\text{m}$). Messung bei RT. Darstellung ähnlich zu [150].

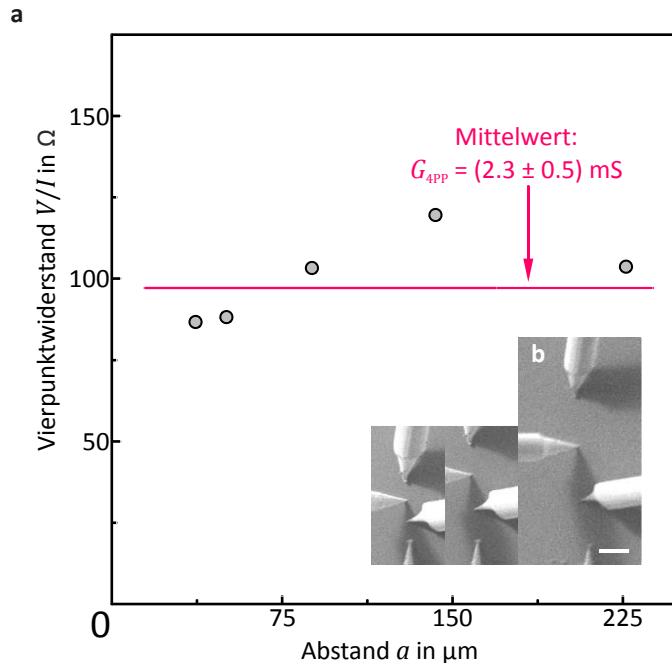


Bild 6.4| Äquidistante 4PP-Messung auf dem 14 QL dicken Bi₂Te₃-Film. Messung an der gleichen Position wie in Bild 6.4. (a) Auftragung des Vierpunktswiderstands V/I über den genutzten Abstand a der Spitzen zueinander. (b) SEM-Aufnahmen der Messungen (weißer Balken entspricht $150 \mu\text{m}$). Messung bei RT. Darstellung ähnlich zu [150].

6.1.4 STP-Messung

In Bild 6.5 ist eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für den 14 QL Bi₂Te₃-Film gezeigt, wobei die STP-Messung wie die 2PP-Messung in der Mitte der Bi₂Te₃-Probe durchgeführt wurde. Der Abstand der Kontaktspitzen beträgt $d = (200 \pm 10) \mu\text{m}$, wobei sich die Tunnelspitze mittig zwischen den Kontaktspitzen befindet. Nach Gleichung (5.3) lässt sich dann bei einem Schichtleitcharakter die 2D-Stromdichte mit $j_{2D} = 2I_{\text{quer}}/(\pi d)$ abschätzen.

Die zugehörige STP-Messung ist in Bild 6.6 gezeigt. Die Stromrichtung in der STP-Messung ist durch die Kontaktgeometrie so gewählt worden, dass der Querstrom möglichst senkrecht zur Stufung des Bi₂Te₃-Films bzw. senkrecht zu den Substratstufen verläuft. Dies ist auch in der Topographie in Bild 6.6a zu sehen.

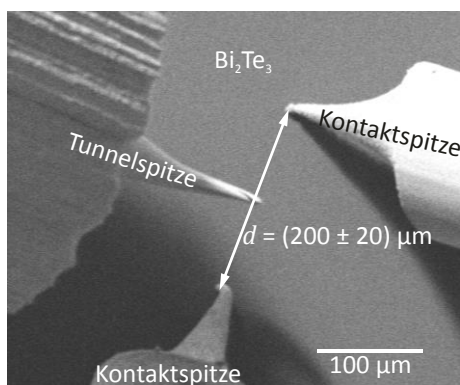


Bild 6.5| STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung bei RT auf dem 14 QL Bi₂Te₃-Film. Bild ähnlich zu [150].

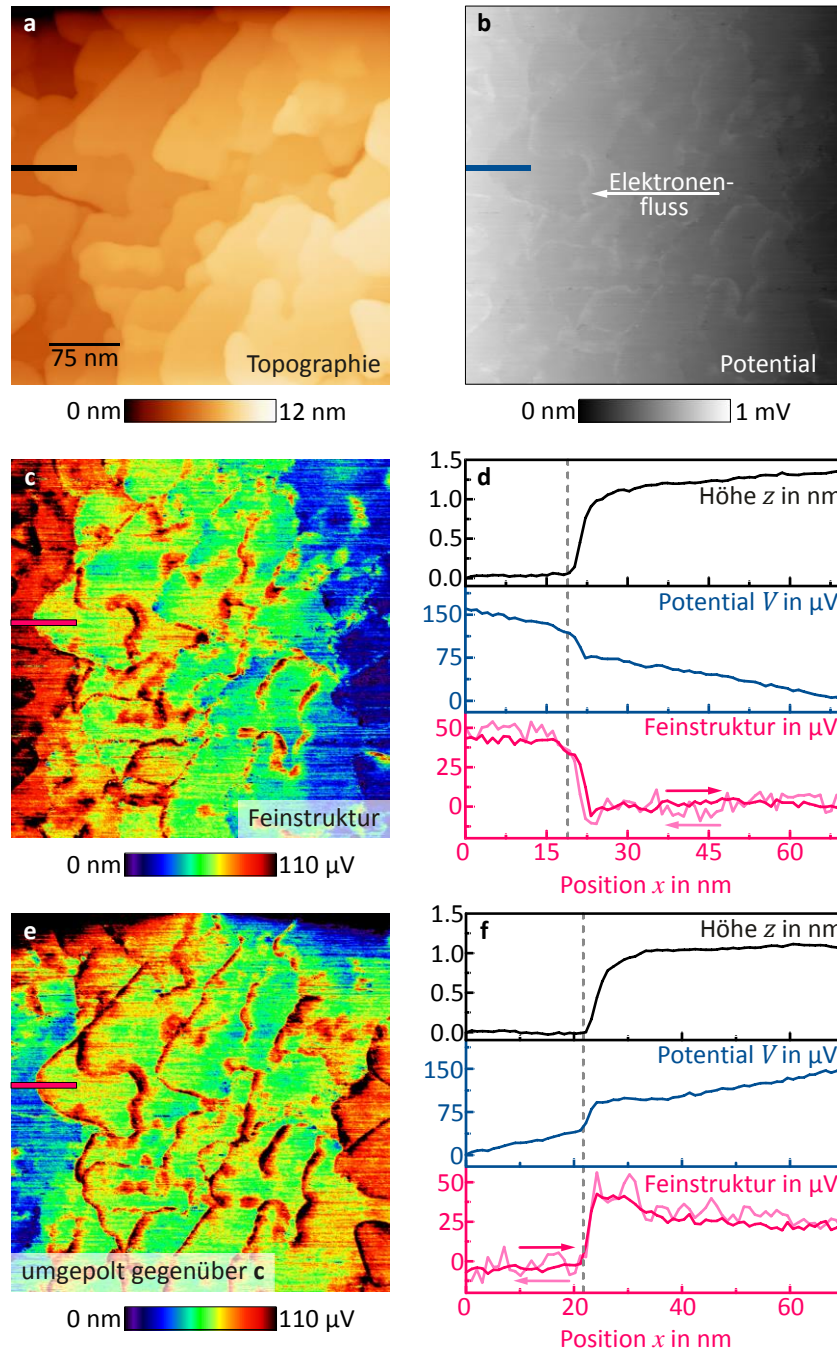


Bild 6.6| STP-Messung auf dem 14 QL Bi_2Te_3 -Film. STP-Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 3 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.269 kHz, $I_t = 8 \text{ pA}$ und $400 \times 400 \text{ nm}^2$. $V_{\text{quer}} = 0.74 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +0.77 \text{ mA}$ für **a-d** sowie $V_{\text{quer}} = -0.74 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -0.77 \text{ mA}$ für **e** und **f**. **(a)** Topographie. **(b)** Potential. **(c)** Feinstruktur des Potentials (Abzug des konstanten Gradienten auf den Terrassen). **(d)**, Profilinien (gemittelt über 4 Scanzeilen) entlang der in **a-c** markierten Linie. **(e)** und **(f)** zeigen die Feinstruktur und Profile von Topographie, Potentials und Feinstruktur an der gleichen Stelle wie in **c** und **d** für eine umgekehrte Polarität der Querspannung (schwarzen Bereich oben ist ein Messartefakt)). In den Profilinien der Feinstruktur ist in blasserer Farbe die Rückrichtung ohne Mittelung (d. h. eine einzelne Scanzeile) gezeigt. Darstellung ähnlich zu [150].

Das zugehörige Potential in Bild 6.6b zeigt als Hauptmerkmal einen konstanten Gradienten mit einem Betrag von $E = (18.3 \pm 0.2) \text{ V/cm}$. Mit dem gegebenen Querstrom der Messung von $I_{\text{quer}} = 0.77 \text{ mA}$ ergibt sich die abgeschätzte, lokale 2D-Stromdichte zu $j_{2D} = (24.5 \pm 2.5) \text{ mA/cm}$. Damit folgt für den Filmleitwert $G_{\text{STP}} = j_{2D}/E = (1.3 \pm 0.2) \text{ mS}$. Neben dem Gradienten sind noch weitere, kleinere Potentialmerkmale zu erkennen. Durch Abzug eines mittleren Gradienten von etwa $(16.7 \pm 0.5) \text{ V/cm}$ vom Potential wurde diese Feinstruktur in Bild 6.6c sichtbar gemacht. Es zeigen sich zwei Potentialsprünge, die sich durch Bild 6.6c mehr oder minder gerade durchziehen. Die Potentialsprünge sind manchmal mit Stufenkanten korreliert, jedoch laufen sie zum Teil auch über Terrassen hinweg. Daher handelt es sich ähnlich wie in Kapitel 5.4.4 vermutlich um Domänengrenzen (DG) des Bi₂Te₃-Films, die jedoch in der Topographie im Rahmen der Messauflösung nicht zu erkennen sind, sondern sich nur durch einen mittleren Potentialsprung von etwa $(38 \pm 8) \mu\text{V}$ bemerkbar machen. Die Spannungssprünge sind unabhängig von der Scanrichtung (siehe Profillinien in Bild 6.6d) und reagieren auf Umkehr des Querstroms (siehe Feinstruktur in Bild 6.6e). Neben den dominanten Spannungssprüngen finden sich in der Feinstruktur zudem noch Signale an der Position von Stufenkanten. Diese sind unabhängig von Scan- und Querstromrichtung. Es handelt sich daher wie in Kapitel 5.2.3 vermutlich um Thermospannungssignale.

6.1.5 STP-Studie einer 1 QL-Stufenkante

Die zuvor gefundenen Thermospannungssignale an den Stufenkanten auf dem Bi₂Te₃-Film könnten Spannungssprünge verdecken, die analog zu Kapitel 5.3.3 durch Streuung von Leitungselektronen an den Bi₂Te₃-Stufenkanten hervorgerufen werden könnten. Um dies zu prüfen, wurde analog zu Kapitel 5.3.4 eine stromabhängige Messung des Potentialverlaufs senkrecht zu einer 1 QL-Stufe auf der Bi₂Te₃-Oberfläche durchgeführt. Dabei wurde die Stufenkante mit einem Programm (siehe Kapitel 9.4.2) derart bearbeitet, dass die Stufe senkrecht zur schnellen Scanrichtung bzw. Stromrichtung steht (siehe Beispiel in Bild 6.7a). In Bild 6.7b sind die über alle Scanzeilen gemittelten Profile der Topographie und des Potentials aus Bild 6.7a inklusive der Feinstruktur des Potentials gezeigt. In der Feinstruktur ist eine ungemittelte Scanzeile der Rückrichtung gezeigt, die die Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses durch die Mittelung verdeutlicht. In der Topographielinie in Bild 6.7b ergibt sich die Höhe der Stufe aus Bild 6.7a zu $(1030 \pm 40) \text{ pm}$, entsprechend dem Wert einer QL in Bi₂Te₃ (1019 pm). Im Potential kann der Spannungssprung an der Stufenkante ($x = 0$) bereits deutlich vom Gradienten auf den Terrassen unterschieden werden. Die positive und negative Scanrichtung des Potentials haben eine unterschiedliche Steigung (siehe Bild 6.7b), wobei in der Feinstruktur kein signifikanter Unterschied zu erkennen ist. Das für Bild 6.7 beschriebene Vorgehen wurde für insgesamt 7 Aufnahmen inklusive beider Scanrichtungen durchgeführt.

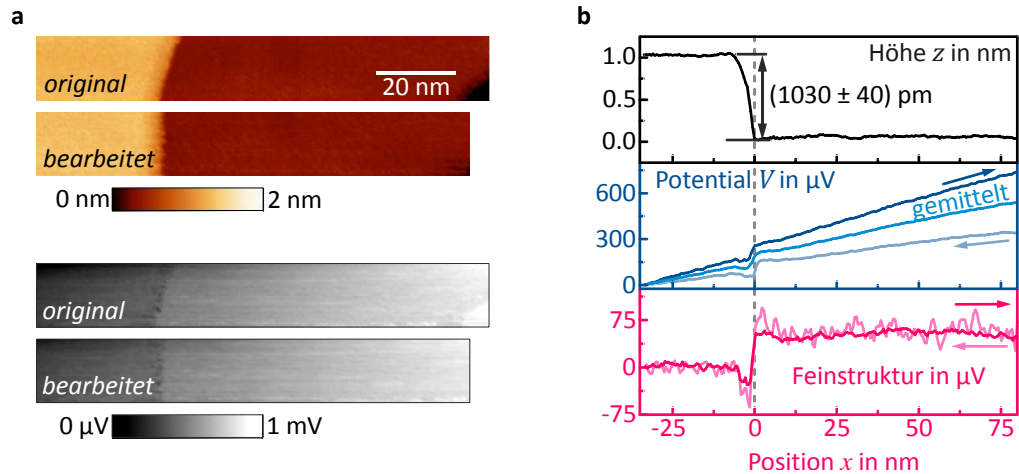


Bild 6.7 | STP-Analyse einer 1 QL hohen Bi_2Te_3 -Stufe. (a) originale STP-Aufnahme ($V_{\text{mod}} = 3 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.269 kHz , $I_t = 10 \text{ pA}$, $116.8 \times 16.2 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = 1.97 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = 1.98 \text{ mA}$, Messung bei RT) und bearbeitete STP-Aufnahme. Man sieht deutlich, dass die Stufenkante gerade gerückt ist. (b) Mittelung über alle Scanzeilen für Topographie, Potential und Feinstruktur aus a. In blässerer Farbe ist die Scanrückrichtung für das Potential (gemittelt) und in der Feinstruktur (ungemittelt, d. h. eine Scanzeile) gezeigt.

Dabei wurde die Stärke des Querstroms von etwa -2 mA bis zu $+2 \text{ mA}$ variiert. Für alle Aufnahmen zeigte sich analog zu Bild 6.7b eine unterschiedliche Steigung des Potentials auf den Terrassen für beide Scanrichtungen (siehe hierzu Kapitel 9.3.2). Höhere Steigungen des Potentials lagen vor, wenn die Scanrichtung in Richtung des Potentialanstiegs lag. Umgekehrt lagen kleinere Steigungen des Potentials vor, wenn die Scanrichtung entgegen dem Potentialanstieg lag. Die Potentialsprünge werden hierdurch nicht signifikant beeinflusst. Demnach scheint eine Drift im Potential vorzuliegen, die vor allem die Steigung des Potentials auf den Terrassen je nach Scanrichtung erhöht oder erniedrigt. Auf Grund der Drift wurden die Profile der positiven und negativen Scanrichtung der jeweiligen Messungen gemittelt, um die Drift zu eliminieren (vgl. auch Bild 6.7b). An das gemittelte Potential wurde im Bereich der unteren Terrasse ($x > 0$) ein linearer Fit angelegt. Da die obere Terrasse ($x < 0$) sehr kurz ist, wurde für einen linearen Fit die Steigung E_T der unteren Terrasse genutzt und nur die Ordinate des Fits an die Messdaten der oberen Terrasse angepasst. Aus dem Versatz der beiden linearen Fits am Ort der QL-Stufe ($x = 0$) wurde der Spannungssprung ermittelt. Dieses Vorgehen wurde für alle 7 Aufnahmen durchgeführt. In Bild 6.8a sind die über beide Scanrichtungen gemittelten Potentialschnitte an der Stufenkante für verschiedene Querströme I_{quer} gezeigt, wobei neben dem Spannungssprung auch Thermospannungssignale an der Stufenkante sichtbar sind (z. B. im Profil für $I_{\text{quer}} = 0 \text{ mA}$ in Bild 6.8a). Als Folge der höheren Stromdichte wird der Betrag von E_T und ΔV größer, wie man anhand der fächerartigen Form in Bild 6.8a und anhand der großen Linearität bei der Auftragung von E_T über I_{quer} Bild 6.8b sehen kann ($I_{\text{quer}}/E_T = (428 \pm 7) \text{ S}\cdot\text{nm}$). Analog hierzu zeigt auch ΔV gegen I_{quer} einen linearen Zusammenhang von $I_{\text{quer}}/\Delta V = (48 \pm 12) \text{ S}$.

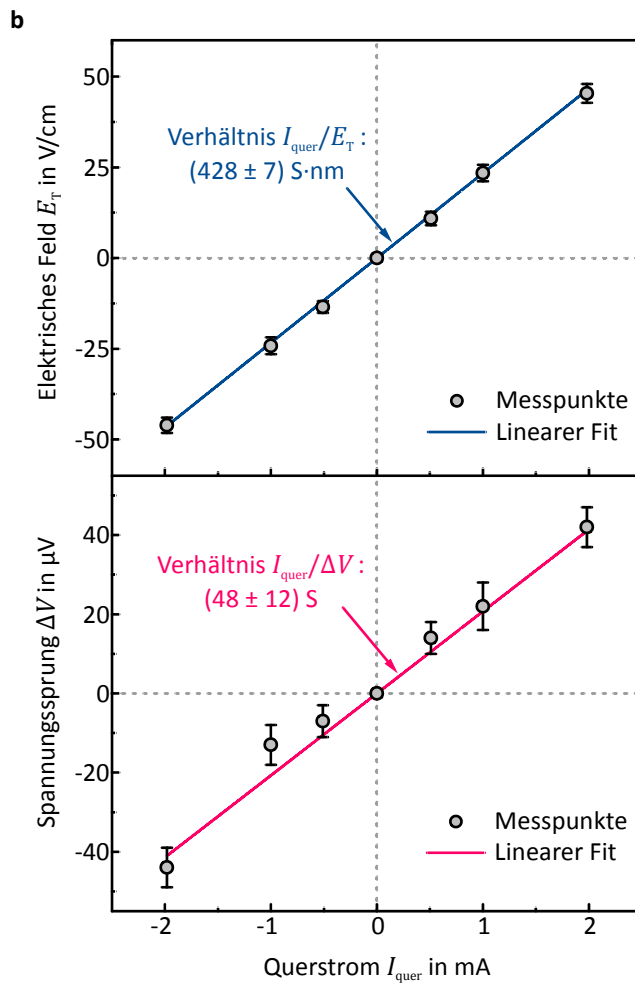
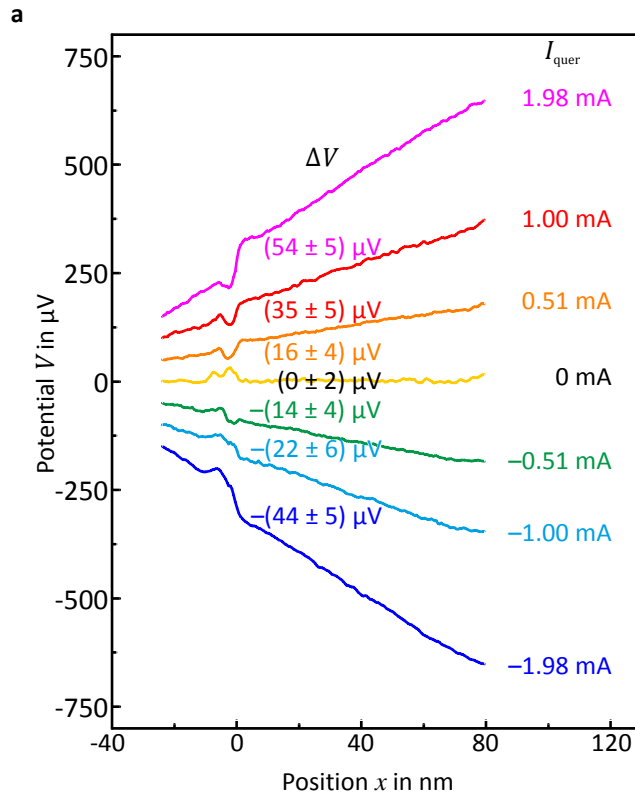


Bild 6.8| STP-Studie einer 1 QL hohen Bi₂Te₃-Stufe. (a) Profile des Potentials in Richtung des Elektronenflusses entlang der 1 QL Stufe für verschiedene Querströme I_{quer} (gemittelt über beide Scanrichtungen, Messungen bei RT). Die Profile sind zur besseren Übersicht vertikal versetzt. Für jedes Profil wurde an die untere Terasse ($x > 0$) ein linearer Fit angelegt, dessen Steigung E_T auch für die obere Terasse ($x < 0$) benutzt wurde. Aus dem Versatz beider Terrassensteigungen an der Position der Stufenkante ($x = 0$) wurde der zugehörige Spannungssprung ΔV ermittelt. (b) Auftragung von E_T und ΔV gegen I_{quer} . An die jeweiligen Messpunkte wurde ein linearer Fit durch den Ursprung angepasst.

6.1.6 Diskussion

Aus den 2PP-Messungen an leicht verschiedenen Messpositionen in der Mitte der Probe wurden globale Leitwerte G_{2PP} (μm -Skala) der Bi_2Te_3 -Schicht von $(1.2 \pm 0.1) \text{ mS}$ und $(1.5 \pm 0.4) \text{ mS}$ ermittelt. Weiter entfernt von der Probenmitte wurde durch eine abstandsabhängige 4PP-Messung ein globaler Leitwert des Films von $G_{4PP} = (2.3 \pm 0.5) \text{ mS}$ bestimmt. Mehrere äquidistante, lineare 4PP-Messungen mit unterschiedlichen Spitzenabständen an der gleichen Probenposition zeigten einen Leitwertbereich von 1.8-2.6 mS. Ihr Durchschnittswert von $(2.2 \pm 0.3) \text{ mS}$ bestätigt den zuvor durch die abstandsabhängige 4PP-Messung gefundenen Wert. Insgesamt scheint daher der Leitwert der Probe leicht inhomogen zu sein. Vermutlich wird die Inhomogenität durch eine ungleichmäßige Dotierung verursacht, die selbst Folge einer ungleichmäßigen Substrattemperatur oder Substratbeschaffenheit während des Wachstums sein kann. Mittels der STP-Messung wurde lokal (nm-Skala) in der Probenmitte ein Leitwert von $G_{STP} = (1.3 \pm 0.2) \text{ mS}$ bestimmt, der die zuvor in der Probenmitte ermittelten 2PP-Werte bestätigt. Die gefundenen Schichtleitwerte sind vergleichbar mit den in der Literatur gefundenen Werten (z. B. 2.2 mS für einen 15 QL Bi_2Te_3 -Film auf $\text{SrTiO}_3(111)$ bei Ngabonziza et al. [152]).

Die Leitfähigkeit des topologischen Oberflächenzustands (TSS) auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche zum Vakuum hin wird gemäß Hoefer et al. [87] mit $\sigma_s = 0.6\text{-}0.8 \text{ mS}$ angenommen (siehe auch Kapitel 4.4.3 und Tabelle 4.4). Für die vorliegenden Schichtleitwerte ergibt dies einen Anteil des TSS am Stromtransport von etwa $\sigma_s/G = 30\text{-}60 \%$, abhängig von der Messposition auf der Probe. Der restliche Stromanteil (70-40 %) wird im Bi_2Te_3 -Film vermutlich vorrangig durch das Filmvolumen getragen, wie man es auch aufgrund der n-Dotierung des Bi_2Te_3 -Films durch Substitutionsfehler im Bi_2Te_3 -Gitter erwartet [74]. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Dotierung so stark ist, dass das chemische Potential des Bi_2Te_3 -Film in Richtung des Valenzbandes verschoben ist und hierdurch zusätzliche Streukanäle in den Volumenzuständen entstehen (siehe auch Bild 4.14b). Da hierdurch auch die Leitfähigkeit im TSS reduziert wird, stellt der benutzte Wert der Leitfähigkeit im TSS an der Bi_2Se_3 -Oberfläche von $\sigma_s = 0.6\text{-}0.8 \text{ mS}$ einen Maximalwert dar und kann in Wirklichkeit auch kleiner sein. Hierdurch würde der Stromanteil σ_s/G im TSS und damit einhergehend die ermittelten Leitfähigkeiten von Streuern im TSS zu hoch eingeschätzt, sodass ihre Bedeutung für den Stromtransport im TSS unterschätzt würde. Daher widersprechen zusätzliche Streukanäle im TSS in die Volumenzustände den nachfolgenden Aussagen über die Streuer nicht.

Lokal wurde in der STP-Messung vor allem ein konstanter Gradient gefunden, der gemäß Kapitel 2.2.2 wahrscheinlich auf Phononenstreuung als vorherrschendem Streuprozess im Bi_2Te_3 -Film beruht, wie man es auch aus der Literatur für Bi_2Te_3 bei Raumtemperatur erwarten kann (vgl. [124] und Kapitel 4.4.3).

Zusätzlich zum Gradienten wurden in Bild 6.6 im Potential Spannungssprünge im Bereich von etwa $\Delta V = (38 \pm 8) \mu\text{V}$ gefunden, die anscheinend durch Domängengrenzen (DG) im Bi_2Te_3 -Film verursacht wurden. Der Spannungssprung an

den DG ist unabhängig von der Scanrichtung und kann klar auf das vorhandene Transportfeld zurückgeführt werden. Daher handelt es sich bei den DG um einen lokalen Streuer für die Leitungselektronen im Bi₂Te₃-Film. Der Abstand der beiden in Bild 6.6 vorhandenen Domänengrenzen beträgt etwa 300 nm. Aus dem Gradienten auf den Domänen $E_D = (16.7 \pm 0.5) \text{ V/cm}$ ergibt sich daher eine Spannungsdifferenz entlang der Domäne in Richtung des Stromtransports von etwa 500 μV . Dies ist etwa 13-mal mehr als der Spannungssprung an der DG, d.h. für den Gesamtstromtransport im vorliegenden Bi₂Te₃-Film spielt die DG eine untergeordnete Rolle. Erst wenn die Dichte der DG im Bi₂Te₃-Film stark erhöht ist, wird der Stromtransport im Bi₂Te₃-Film maßgeblich durch die DG beeinflusst werden. Die Leitfähigkeit der Domänengrenze σ_{DG} lässt sich analog zu Kapitel 5.4.5 aus der abgeschätzten Stromdichte $j_{2D} = (24.5 \pm 2.5) \text{ mA/cm}$ und dem mittleren Potentialsprung von $\Delta V = (38 \pm 8) \mu\text{V}$ zu $\sigma_{DG} = j_{2D}/\Delta V = (640 \pm 200) \text{ S/cm}$ berechnen, wenn die Streuung an der DG im gesamten Film stattfindet. Wenn der Spannungssprung an der DG nur durch Streuung der Elektronen im topologischen Oberflächenzustand (TSS) bedingt wäre, ergäbe sich gemäß Gleichung (5.13) $\sigma_{DG,s} = \sigma_s \cdot E/\Delta V = (340 \pm 120) \text{ S/cm}$ für die Leitfähigkeit der DG im TSS. Dabei ist $E = (18.3 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ der mittlere Gesamtgradient sowie $\sigma_s = (0.7 \pm 0.1) \text{ mS}$ die Leitfähigkeit des TSS.

Neben den Spannungssprüngen an den DG des Films waren auch Thermospannungssignale an der Position von Stufenkanten in Bild 6.6 erkennbar. Man kann analog zu Kapitel 5.2.4 abschätzen, wie hoch die Temperaturdifferenz ΔT zwischen Probe und Spitze infolge der durch den Querstrom $I_{\text{quer}} = 0.77 \text{ mA}$ und Querspannung $V_{\text{quer}} = 0.74 \text{ V}$ in die Probe getragenen elektrischen Leistung $P = V_{\text{quer}} \cdot I_{\text{quer}} = 0.57 \text{ mW}$ ist. Die Maße der Probe sind $12 \times 2 \times 0.4 \text{ mm}^3$. Für die Abschätzung soll die elektrische Leistung in der Fläche $A = 2 \times 0.4 \text{ mm}^2$ in der Mitte der Probe in Wärme umgewandelt werden und von dort aus über thermische Leitung an die Stirnflächen der Probe in $d = 6 \text{ mm}$ Entfernung abfließen. Da der Wärmeleitungskoeffizient κ von Si mit $\kappa = 1.48 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63] bei RT deutlich größer ist als derjenige von Bi₂Te₃ mit $0.018 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [125], erfolgt der Wärmetransport wahrscheinlich vor allem über das Si-Substrat. Mit Gleichung (5.6) ergibt sich dann eine Temperaturdifferenz von $\Delta T = P/2 \cdot d/(A \cdot \kappa) = 0.01 \text{ }^\circ\text{C}$. Diese Temperaturdifferenz ist gegenüber Kapitel 5.2.4 ($0.07 \text{ }^\circ\text{C}$) und 5.5.4 ($0.03 \text{ }^\circ\text{C}$) nochmals kleiner, wobei der Wert nur eine untere Grenze markiert: Entgegen der Abschätzung wird die elektrische Leistung in einem viel kleineren Bereich zwischen den Kontaktspitzen dissipiert (Abstand der Spitzen ca. 200 μm). Zudem leitet Bi₂Te₃ aufgrund seines kleinen Wärmeleitungskoeffizienten κ die Wärme schlechter zum Substrat, sodass an der Bi₂Te₃-Oberfläche die Temperatur noch höher ist als in der Abschätzung. Daher erscheint es plausibel, dass ein geeigneter Temperaturgradient für die Messung von Thermospannung in Bild 6.6 vorliegt. Gemäß Gleichung (2.41) wird die Höhe der Thermospannung V_{th} neben der Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe auch von der Variation der normierten Ableitung der Proben-LDOS $D_p(E)$ am mittleren chemischen Potential μ zwischen Spitze und Probe be-

stimmt: $V_{\text{th}} \sim D'_{\text{p}}(\mu)/D_{\text{p}}(\mu)$. Da bei dem vorliegenden Bi_2Te_3 -Film die Thermospannung in der Nähe von Stufenkanten auftrat, müssen diese eine andere LDOS gegenüber den Flächen aufweisen. Ähnliche, aber stärkere Signale wurden bereits in Kapitel 5.2.3 beim 4.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film gefunden. Die Ursache der Thermospannungssignale an den Stufenkanten des Bi_2Te_3 -Films bleibt analog zum Bi_2Se_3 -Film (vgl. Kapitel 5.2.4) offen.

Im Rahmen der STP-Studie an einer einzelnen QL-Stufe im vorangegangenen Kapitel 6.1.5 konnten QL-Stufen als Streuer für Leitungselektronen identifiziert werden: Durch die gemittelten STP-Messungen konnte ein Spannungssprung an der QL-Stufe beobachtet werden, der nicht durch ein Messartefakt erklärt werden kann, sondern echt ist. Dabei liegt die QL-Stufe auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche auf, ohne dass eine DG entlang der Stufe zuvor im Potential erkennbar war. Da sich die Stufenkante an der Oberfläche befindet und es einen recht scharfen, mit der Stufenkante korrelierten Spannungssprung gibt, müsste das Streuereignis wie in Kapitel 5.3.5 nahe der Stufenkante in der Bi_2Te_3 -Oberfläche stattfinden. An der Bi_2Te_3 -Oberfläche befindet sich der TSS, der mit $\sigma_{\text{s}}/G_{\text{STP}} = (54 \pm 16) \%$ eine dominante Rolle in den vorliegenden Bi_2Te_3 -Film einnimmt, d. h. ein merklicher Anteil der Leitungselektronen wird hier im Bi_2Te_3 -Film bei RT über den TSS geführt. Daher wird im Folgenden der Spannungssprung an den Stufenkanten auf Streuung im TSS zurückgeführt (vgl. hierzu auch Kapitel 4.4.3).

Die Relevanz des beobachteten Spannungssprungs im TSS soll über das Verhältnis des Spannungssprung ΔV an der Stufenkante zum Spannungssprung ΔV_{T} im TSS entlang einer Terrasse abgeschätzt werden. Eine typische Terrasse hat auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche eine Breite von etwa $b = 75 \text{ nm}$. Der Anteil des TSS am Gesamttransport liegt bei etwa $\sigma_{\text{s}}/G_{\text{STP}} = 50 \%$. Aus Bild 6.8b sind die Verhältnisse $I_{\text{quer}}/E_{\text{T}} = 428 \text{ S} \cdot \text{nm}$ und $I_{\text{quer}}/\Delta V = 48 \text{ S}$ gegeben. Aus den Werten ergibt sich gemäß Gleichung (5.7) ein Verhältnis von etwa $\Delta V/\Delta V_{\text{T}} = 24 \%$, d. h., die Stufenkanten stellen für den Elektronentransport im TSS ähnlich zu Stufenkanten in Bi_2Se_3 (vgl. Kapitel 5.3.5) einen signifikanten Beitrag dar. Für höhere Stufendichte steigt entsprechend die Bedeutung der Stufenkanten als Streuer für den Elektronentransport an der Bi_2Se_3 -Oberfläche.

Man kann analog zu Kapitel 5.3.5 die Leitfähigkeit $\sigma_{1\text{QL}}$ der 1 QL-Stufe im TSS berechnen. Hierfür wird das Verhältnis $I_{\text{quer}}/\Delta V = (48 \pm 12) \text{ S}$ aus Bild 6.8b, der mittlere Gradient $E = (18.3 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ aus Bild 6.6b mit $I_{\text{quer}} = 0.77 \text{ mA}$ und die Leitfähigkeit im TSS $\sigma_{\text{s}} = (0.7 \pm 0.1) \text{ mS}$ benötigt. Gemäß Gleichung (5.9) ergibt sich mit diesen Werten $\sigma_{1\text{QL}} = (800 \pm 330) \text{ S/cm}$. Der Wert liegt niedriger als die Leitfähigkeit von 1 QL-Stufen bei Bi_2Se_3 ($1080 \pm 540) \text{ S/cm}$. Zwar überschneiden sich beide Werte im Rahmen ihrer Fehler, dennoch scheint es plausibel, dass der Wert bei Bi_2Te_3 geringer ist als bei Bi_2Se_3 . Gemäß Kapitel 4.4.3 ist die elastische Streuung im TSS an Stufenkanten in Bi_2Te_3 durch die höhere Zahl an Extrempunkten in der Bandstruktur gegenüber Bi_2Se_3 erhöht (siehe auch Bild 4.16 in Kapitel 4.3.3). Das vorliegende Ergebnis scheint also die STS-Experimente und die Theorie von J. Wang et al. [128] zur Streuung von Elektronen an Stufenkanten in Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 zu bestätigen, wobei in dieser Arbeit

die Messung unter wirklichen Transportbedingungen, d. h. mit einem lateraler Querstrom, im Bi₂Te₃-Film erfolgte.

Im Vergleich zur DG-Leitfähigkeit ($\sigma_{\text{DG},s} = (340 \pm 120) \text{ S/cm}$ bezogen auf TSS) ist die Leitfähigkeit an der Stufenkante etwas mehr als doppelt so hoch. Dies entspricht weitestgehend dem Befund in Kapitel 5.4.5 für DG auf Bi₂Se₃, die ebenfalls stärkere Transportbarrieren als die QL-Stufen darstellten. In Kapitel 5.4.5 wurde dies durch Ergebnisse von Liu et al. [141] gestützt, die eine topologische Veränderung an DG in Bi₂Se₃ gefunden und dementsprechend einen starken Einfluss auf Leitungselektronen postuliert hatten. Für DG in Bi₂Te₃ kann man einen ähnlichen Zusammenhang erwarten. Man erkennt die Dominanz der DG auch zum Beispiel in Bild 6.6c, wo die DG sich vorrangig als Streuer für Leitungselektronen zeigten, während an den 1 QL-Stufen Thermospannungssignale beobachten wurden. Gemäß der ermittelten Leitfähigkeit der QL-Stufenkanten im TSS erwartet man für die 1 QL-Stufen einen Spannungssprung von etwa $(17 \pm 3) \mu\text{V}$ in Bild 6.6c. Da jedoch das Rauschen der Messung in Bild 6.6c in einem Bereich um $20 \mu\text{V}$ lag und zudem Thermospannungssignale in der STP-Messung am Ort der Stufenkanten auftraten, erscheint es plausibel, dass keine eindeutigen Spannungssprünge an den QL-Stufen beobachtet werden konnten. Erst mit der Erhöhung des Rausch-Signal-Verhältnisses durch die Mittelung an der Stufenkante in der STP-Studie in Kapitel 6.1.5 konnte der Spannungssprung gemessen werden. Dabei zeigte sich eine lineare Abhängigkeit von I_{quer} zu ΔV . Insgesamt konnten sowohl Domänengrenzen als auch Stufenkanten in diesem Kapitel als Streuer bzw. als nanoskalige Widerstände für Leitungselektronen in Bi₂Te₃ identifiziert werden.

6.2 Eisen auf einer Bi₂Te₃-Oberfläche

Im folgenden Kapitel wurde der Einfluss von Eisen (Fe) als magnetisches Material auf der Bi₂Te₃-Oberfläche für den Stromtransport im Bi₂Te₃-Film untersucht (nachfolgend kurz als Fe/Bi₂Te₃-System bezeichnet).

6.2.1 Präparation

Für die Herstellung des Systems Fe/Bi₂Te₃ wurde als Probe der in Kapitel 6.1 hergestellte Bi₂Te₃-Film benutzt (Filmpräparation siehe Kapitel 6.1.1). Auf die reine Bi₂Te₃-Oberfläche wurde mittels eines Elektronenstoßverdampfers (Mini-Vap 100 von MDC, vgl. Kapitel 3.1.1) von einem Eisenstab (Reinheit 99.99 %) Eisen (Fe) auf die Probenoberfläche gedampft. Der Verdampfer konnte aufgrund eines Defekts der Quarzwaage nicht kalibriert werden. Stattdessen wurde die Verdampferleistung derart eingestellt, dass im Massenspektrometer bei einer

Masse von 56 u (^{56}Fe , häufigstes Isotop) ein Ionenstrom von 8 pA gemessen wurde (Kammerdruck ca. 5×10^{-8} mbar). Die Probe wurde unter diesen Bedingungen bei RT für 30 s mit Fe bedampft. In Bild 6.9a ist eine LEED-Aufnahme der reinen Bi_2Te_3 -Oberfläche gezeigt. Die $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Oberfläche hat nur das hexagonale Beugungsmuster des Bi_2Te_3 in Bild 6.9b, wobei die Intensität der Beugungsspotts gegenüber Bild 6.9a abgeschwächt erscheint. Unter dem STM zeigt sich die Bi_2Te_3 -Oberfläche mit vielen Fe-Adsorbaten belegt (siehe Bild 6.9c), die rundlich mit einem Durchmesser von etwa (8 ± 4) nm erscheinen. Im Profil in Bild 6.9d haben die Fe-Adsorbate eine Höhe von etwa (0.7 ± 0.3) nm, d. h., die Adsorbate sind annähernd so hoch wie die QL des Bi_2Te_3 -Film (Höhe ca. (1.0 ± 0.1) nm).

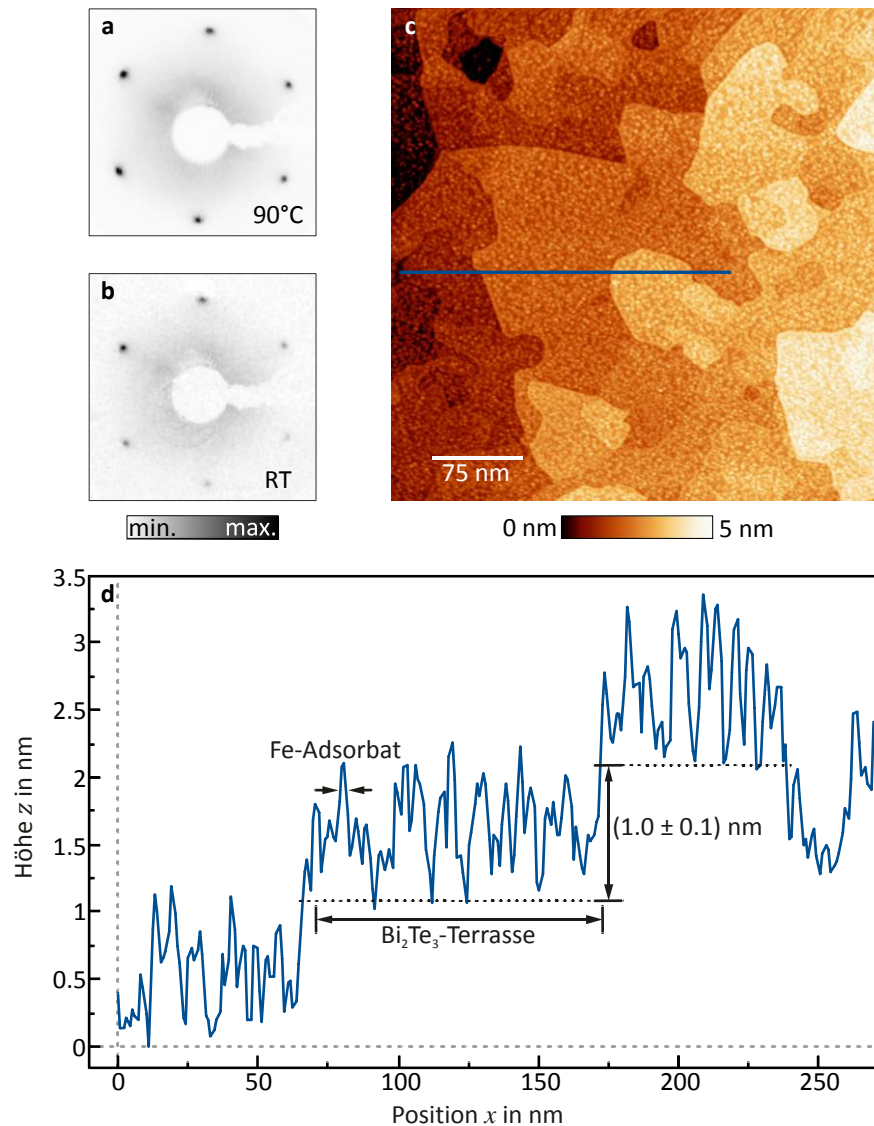


Bild 6.9| Struktur der $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Oberfläche. LEED-Aufnahmen (Elektronenenergie 35 eV, Proben temperatur im jeweiligen LEED-Bild) des (a) reinen Bi_2Te_3 -Films und des (b) mit Fe bedampften Bi_2Te_3 -Films. (c) STM-Aufnahme des bedampften Bi_2Te_3 -Films (Messung bei RT, $V_t = 0.3$ V, $I_t = 10$ pA, 400×400 nm²). (d) Profil (ungemittelt) entlang der Linie in c.

6.2.2 4PP-Messung

Zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften des Fe/Bi₂Te₃-Systems wurde analog zu Kapitel 6.1.3 eine 4PP-Messung durchgeführt.

Bild 6.10a und Bild 6.10b zeigen eine abstandsabhängige 4PP-Messung auf der Fe/Bi₂Te₃-Oberfläche. Dafür wurde eine lineare 4PP-Messung mit dem Spitzenabstand $a = (45 \pm 5) \mu\text{m}$ gewählt und die Position einer der stromführenden Spitzen in Richtung der linearen 4PP-Messung variiert (Strecke s in Bild 6.10b). Für jede Variation wurde der Vierpunktswiderstand V/I gemessen (vgl. auch Bild 9.16 in Kapitel 9.3.2). Die Auftragung von V/I ($66\text{--}103 \Omega$) über die Strecke s ($37\text{--}442 \mu\text{m}$) ergibt die abstandsabhängige Widerstandsmessung (Bild 6.10a). An die Messpunkte wurde mit Gleichung (2.54) der Fall einer Schichtleitung angepasst. Die Fitkurve gibt den Verlauf der Messdaten gut wieder, wobei ein Schichtleitwert von $G_{4PP} = (2.1 \pm 0.2) \text{ mS}$ bestimmt wurde.

Im gleichen Probenbereich wurden zudem mehrere klassische lineare 4PP-Messungen mit unterschiedlich großen Spitzenabständen a ($34\text{--}139 \mu\text{m}$) durchgeführt (siehe Bild 6.11a und Bild 6.11b sowie Bild 9.17 in Kapitel 9.3.2). Nach Gleichung (2.51) sollte der Vierpunktswiderstand V/I im Fall einer Schichtleitung konstant bleiben, wie man es in der Auftragung von V/I über a in Bild 6.11a auch sieht. Dabei weisen die Vierpunktswiderstände eine gewisse Streuung von $94\text{--}123 \Omega$ auf, was nach Gleichung (2.51) einem Leitwert von $1.8\text{--}2.3 \text{ mS}$ entspricht. Die leichte Variation des Leitwertes wurde zuvor bereits in ähnlicher Weise in Kapitel 6.1.3 bei der reinen Bi₂Te₃-Oberfläche gefunden. Mit $G_{4PP} = (2.0 \pm 0.4) \text{ mS}$ liegt der Mittelwert des Leitwerts der linearen 4PP-Messungen nahe dem zuvor durch die abstandsabhängige 4PP-Messung gefundenen Leitwert von $(2.1 \pm 0.2) \text{ mS}$.

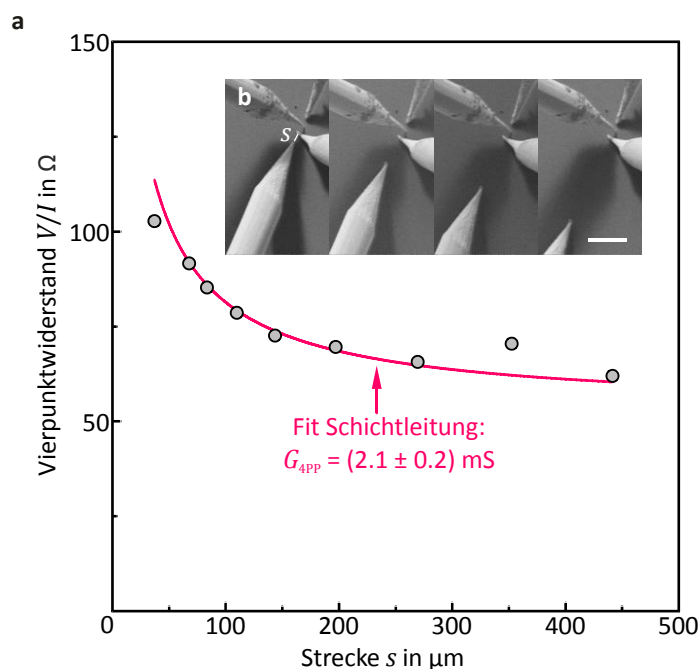


Bild 6.10 | Abstandsabhängige 4PP-Messung auf Fe/Bi₂Te₃.

(a) Auftragung des Vierpunktswiderstands V/I über den Betrag der variierten Strecke s . Die anderen Spitzen haben den Abstand $a = (45 \pm 10) \mu\text{m}$ zueinander. (b) SEM-Aufnahmen der Messung (weißer Balken entspricht $250 \mu\text{m}$). Messung bei RT. Bild ähnlich zu [150].

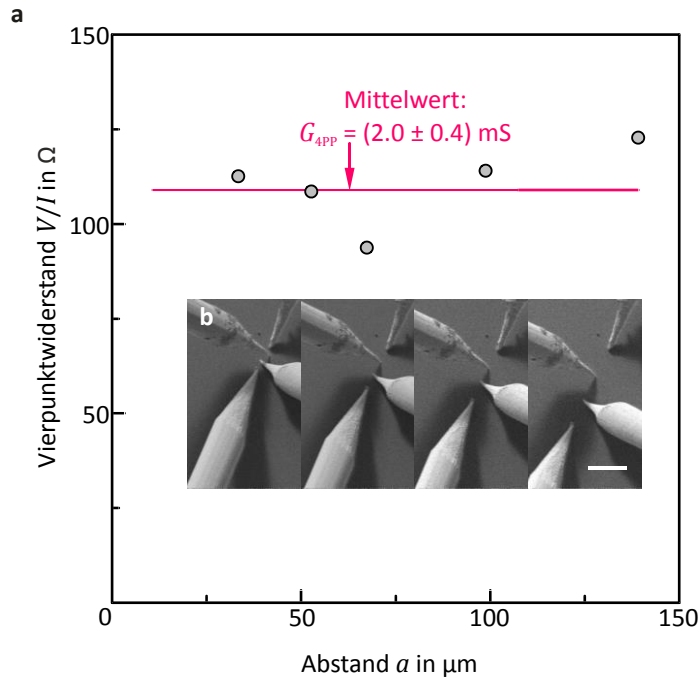


Bild 6.11| Äquidistante 4PP-Messung auf $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$.

(a) Auftragung des Vierpunkt-widerstands V/I über den ge-nutzten Abstand a der Spitzen zueinander. (b) SEM-Aufnah-men der Messungen (weißer Balken repräsentiert 100 μm). Messung bei RT. Darstellung ähnlich zu [150].

6.2.3 STP-Messung

Bild 6.12 zeigt eine SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung des $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Systems. Die Tunnelspitze befindet sich nicht in der Mitte der Verbindungslinie der beiden Kontaktspitzen, sondern näher an der linken Kon-taktspitze (Abstand $b = (110 \pm 10) \mu\text{m}$) als an der rechten Kontaktspitze (Ab-stand $a = (180 \pm 10) \mu\text{m}$). Nach Gleichung (5.5) lässt sich für diese Geometrie bei einer Schichtleitung die 2D-Stromdichte zu $j_{2D} = I_{\text{quer}}/(2\pi) \cdot (1/a + 1/b)$ abschätzen. Bild 6.13 zeigt die zugehörige STP-Messung. Die Stromrichtung in der STP-Messung liegt entlang der schnellen Scanrichtung und damit senkrecht zur Stufung des Bi_2Te_3 -Films (vgl. Bild 6.13).

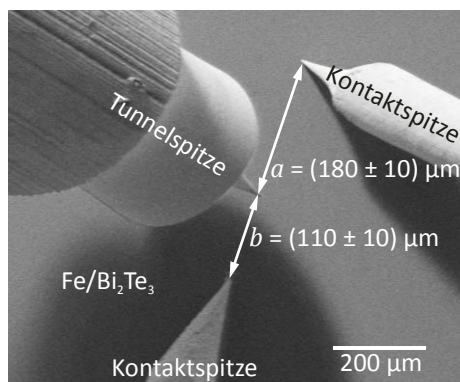


Bild 6.12| STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kon-taktgeometrie für die STP-Messung bei RT auf der $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Oberfläche. Bild ähnlich zu [150].

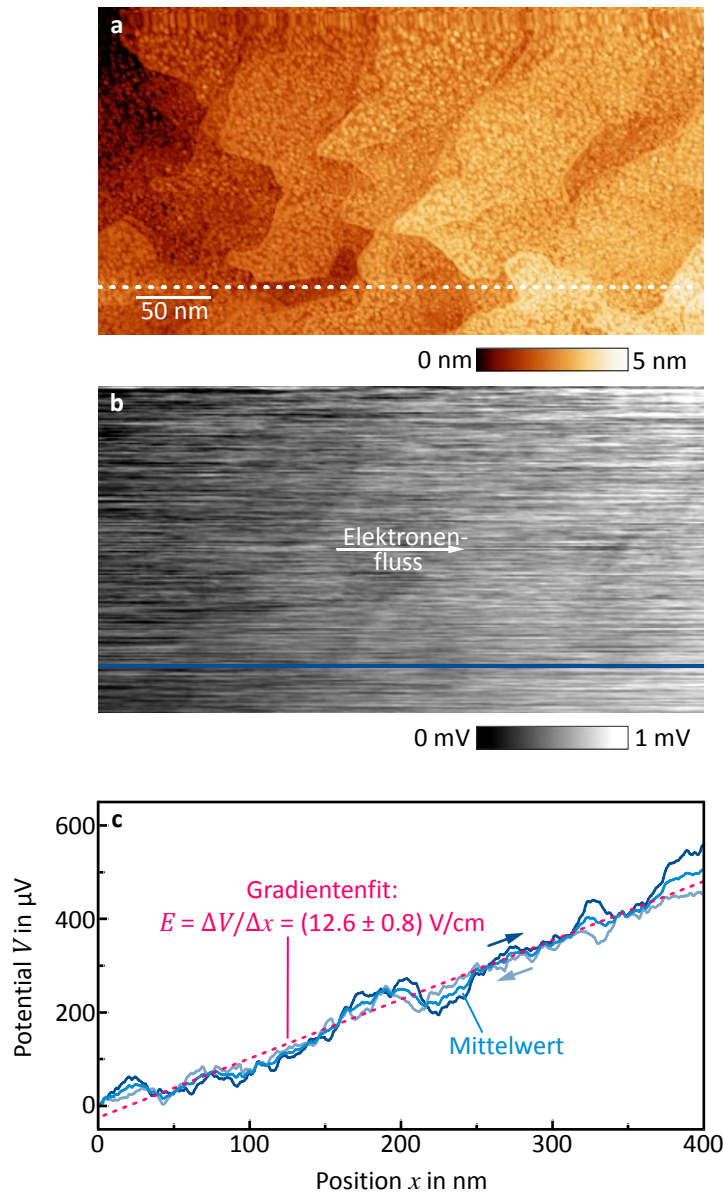


Bild 6.13 | STP-Studie der Fe/Bi₂Te₃-Oberfläche.

Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 4 \text{ mV}_{\text{pp}}$ bei 2.1 kHz, $I_t = 7 \text{ pA}$, $400 \times 220 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = 1.85 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = 0.91 \text{ mA}$. (a) Topographie der Fe/Bi₂Te₃-Oberfläche. (b) Simultan gemessenes Potential. (c) Profil des Potentials (Pfeil \rightarrow) mit Rückrichtung (Pfeil \leftarrow) entlang der Linie in b (über 7 Scanzeilen gemittelt). An den Mittelwert beider Profile wurde ein linearer Fit zur Bestimmung des Gradienten angelegt.

Das zugehörige Potential in Bild 6.13b zeigt als Hauptmerkmal einen konstanten Gradienten mit einem mittleren Betrag von etwa $E = (12.6 \pm 0.8) \text{ V/cm}$. Mit dem benutzten Querstrom von $I_{\text{quer}} = 0.91 \text{ mA}$ ergibt sich eine lokale 2D-Stromdichte von $j_{2\text{D}} = (21.2 \pm 3.1) \text{ mA/cm}$. Damit folgt für den Filmleitwert $G_{\text{STP}} = j_{2\text{D}}/E = (1.7 \pm 0.4) \text{ mS}$. Neben dem Gradienten scheinen noch weitere Potentialmerkmale vorhanden zu sein, die zum Teil mit den Bi₂Te₃-Stufenkanten korreliert sind und zum Beispiel von dem in Kapitel 6.1.4 gefundenen Domänengrenzen herrühren können. Leider konnte im Rahmen des Messrauschens kein geeigneter Abzug des Gradienten durchgeführt werden, anhand dessen man eine Stufung des Potentials hätte erkennen können. Zudem scheint an manchen Stellen das Potential auch durch die vorhandenen Fe-Adsorbate leicht moduliert zu werden. Da die STP-Messung recht instabil war, konnte keine Aufnahme mit umgekehrter Polarität gemacht werden. Daher kann für die Signale an den Stu-

fen bzw. Fe-Adsorbaten nicht festgestellt werden, ob es sich um Artefakte durch die STM-Messung, um Thermospannungssignale oder um aus dem Transportfeld bedingte Merkmale handelt. Der Gradient kann jedoch gemäß den Messungen in Kapitel 6.1.4 als durch das Transportfeld verursacht angesehen werden.

6.2.4 Diskussion

Die globalen (μm -Skala) 4PP-Messungen ergeben für den mit Fe bedeckten Bi_2Te_3 -Film einen Schichtleitwert von $(2.1 \pm 0.2) \text{ mS}$ (abstandsabhängig) bzw. $(2.0 \pm 0.4) \text{ mS}$ (äquidistant). Die entsprechenden Werte für die reine Bi_2Te_3 -Oberfläche fallen mit Leitwerten von $(2.2 \pm 0.3) \text{ mS}$ (abstandsabhängig) und $(2.3 \pm 0.5) \text{ mS}$ (äquidistant) im Rahmen ihrer Fehler praktisch identisch aus. Ganz ähnlich verhält es sich mit den lokal (nm-Skala) über die STP-Messung bestimmten Leitwerten: Für die $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Oberfläche findet sich $(1.7 \pm 0.4) \text{ mS}$, während die reine Bi_2Te_3 -Oberfläche den Wert $(1.3 \pm 0.2) \text{ mS}$ aufweist. Bedenkt man, dass sich in Kapitel 6.1 eine recht breite Streuung der Leitwerte von 1.2-2.3 mS aus der 2PP-, 4PP- und STP-Messungen zeigte, kann für die $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Probe keine signifikante oder auffällige Änderung der Leitwerte beobachtet werden. Damit unterscheidet sich das System $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ vom System $\text{Bi}/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ (siehe Kapitel 5.5) (bzw. $\text{Bi}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$, vgl. [146]), bei dem das Bi in Form von Inseln auf der Oberfläche wahrscheinlich zu einer Ladungsträgererhöhung im Film führte und der Schichtleitwert des Films signifikant anstieg (vgl. Kapitel 5.5.4).

Im Potential der STP-Messung wurde vorrangig ein konstanter Gradient gefunden, wie auch schon bei der reinen Bi_2Te_3 -Oberfläche (vgl. Kapitel 6.1.4). Der Gradient kann gemäß Kapitel 2.2.2 wahrscheinlich auf Phononenstreuung als vorherrschenden Streuprozess im $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Film zurückgeführt werden, wie man es auch aus der Literatur für reines Bi_2Te_3 bei Raumtemperatur erwartet (Kapitel 4.4.3). Zwar scheinen einige morphologische Strukturen (Stufenkanten bzw. Domänengrenzen sowie die Fe-Adsorbate) das Potential zu beeinflussen, jedoch konnte im Rahmen der vorhandenen Messdaten und ihrer Auflösung keine gesicherte Aussage hierüber getroffen werden.

Eigentlich hatte man für TI erwartet, dass magnetische Adsorbate durch ihre magnetischen Momente eine Bandlücke im TSS des TI öffnen und insgesamt die lokale Zustandsdichte erniedrigen, sodass ein ferromagnetischer Film entstehen sollte [153]. ARPES-Experimente an der $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Oberfläche haben allerdings gezeigt, dass der Oberflächenzustand von Bi_2Te_3 völlig unberührt und intakt neben den vorhandenen Fe-Adsorbaten bleibt [154]. Man führt dies auf eine geringe Hybridisierung des Fe mit dem Bi_2Te_3 -Substrat zurück, die nur zur Ausbildung eines zusätzlichen Zustands führt [155]. Für das Schwestersystem $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ wurde ein analoges Verhalten gefunden [156]. Die hier gefundene, unveränderte globale Leitungseigenschaft des Bi_2Te_3 -Films nach der Bedeckung mit Fe steht also im Einklang mit den experimentellen Befunden in der Literatur.

6.3 Volumenprobe Bi₂Te₃

Ergänzend zu den vorangegangenen Untersuchungen an Bi₂Te₃-Filmen wurde eine Studie an einer Bi₂Te₃-Volumenprobe durchgeführt. Hierfür wurde ein kommerziell bei der Firma MIT Corp. USA erworbener Bi₂Te₃-Kristall benutzt (Maße $1 \times 1 \times 10 \text{ mm}^3$, Reinheit 99.999 %). Die Kristalloberseite ($1 \times 10 \text{ mm}^2$) ist die (111)-Fläche (bezogen auf das rhomboedrische Gitter, siehe auch Bild 4.5), die auch bei den zuvor untersuchten Bi₂Te₃-Filmen die Oberfläche bildete. Die Leitfähigkeit des Bi₂Te₃-Kristalls liegt gemäß MTI im Bereich um 1000 S/cm.

6.3.1 Präparation

Die Bi₂Te₃-Probe wurde zunächst auf einem Probenträger in das UHV-System eingeschleust und auf etwa 100 °C für etwa 60 min geheizt (Kammerdruck ca. 5×10^{-9} mbar). Mittels LEED konnte keine Beugungsreflexe beobachtet werden. Die Probe wurde daher für 120 min bei 250 °C geheizt, ohne dass anschließend im LEED Beugungsreflexe erkennbar waren. Eine Möglichkeit wäre die Exfoliation der obersten Kristalllage gewesen, jedoch wäre hierdurch die vorhandene, hochpolierte Bi₂Te₃(111)-Oberfläche zerstört worden. Stattdessen wurde versucht die Probenoberfläche mittels Sputtern zu säubern.

In der Literatur fanden sich zur Präparation von Bi₂Te₃(111)-Kristallproben mittels Sputtern zwei Publikationen: D. Haneman [157] benutzte zum Sputtern von Bi₂Te₃(111)-Kristallen Ar-Ionen mit einer kinetischen Energie von etwa 400 eV für 30 min, wobei er für das Ausheilen der Oberfläche nach dem Sputtern eine Temperatur von mindestens 200 °C angibt, die wieder zu einer kristallinen Bi₂Te₃(111)-Oberfläche führt. Haneman konnte keinen Einfluss der kinetischen Energie der Ionen feststellen noch eine Veränderung des Ergebnisses beim Ausheilen, als er eine Temperatur von 260 °C benutzte. Coelho et al. [158] benutzten zum Sputtern Argonionen mit einer kinetischen Energie von 1250 eV für 15 min und anschließend Ausheilen der Oberfläche bei 300 °C. Dies wurde für 10 Zyklen durchgeführt. Durch die erhöhte Ausheiltemperatur fanden sich anschließend auf der Bi₂Te₃(111)-Oberfläche zum Teil Bilagen (BL) aus Bi auf den Bi₂Te₃-Terrassen. Auch Schouteden et al. [159] haben Bi-BL auf der Bi₂Te₃-Oberfläche gefunden, nachdem die Oberfläche auf 420 °C geheizt wurde.

Daher wurde für den hier vorliegenden Bi₂Te₃-Kristall zunächst im ersten Sputterdurchlauf die Oberfläche bei RT für etwa 60 min mit Argonionen bombardiert, die eine Beschleunigungsenergie von 750 eV aufwiesen, und anschließend auf 300 °C für 60 min geheizt. Dies geschah in 6 Zyklen. Im LEED waren danach die hexagonalen Reflexe der Bi₂Te₃(111)-Oberfläche schwach sichtbar (siehe Bild 6.14a). Daher wurde anschließend der Bi₂Te₃-Kristall für 60 min auf 300 °C geheizt. Im LEED zeigten sich danach die hexagonalen Spots mit einer deutlich höheren Intensität gegenüber dem Hintergrund (siehe Bild 6.14b).

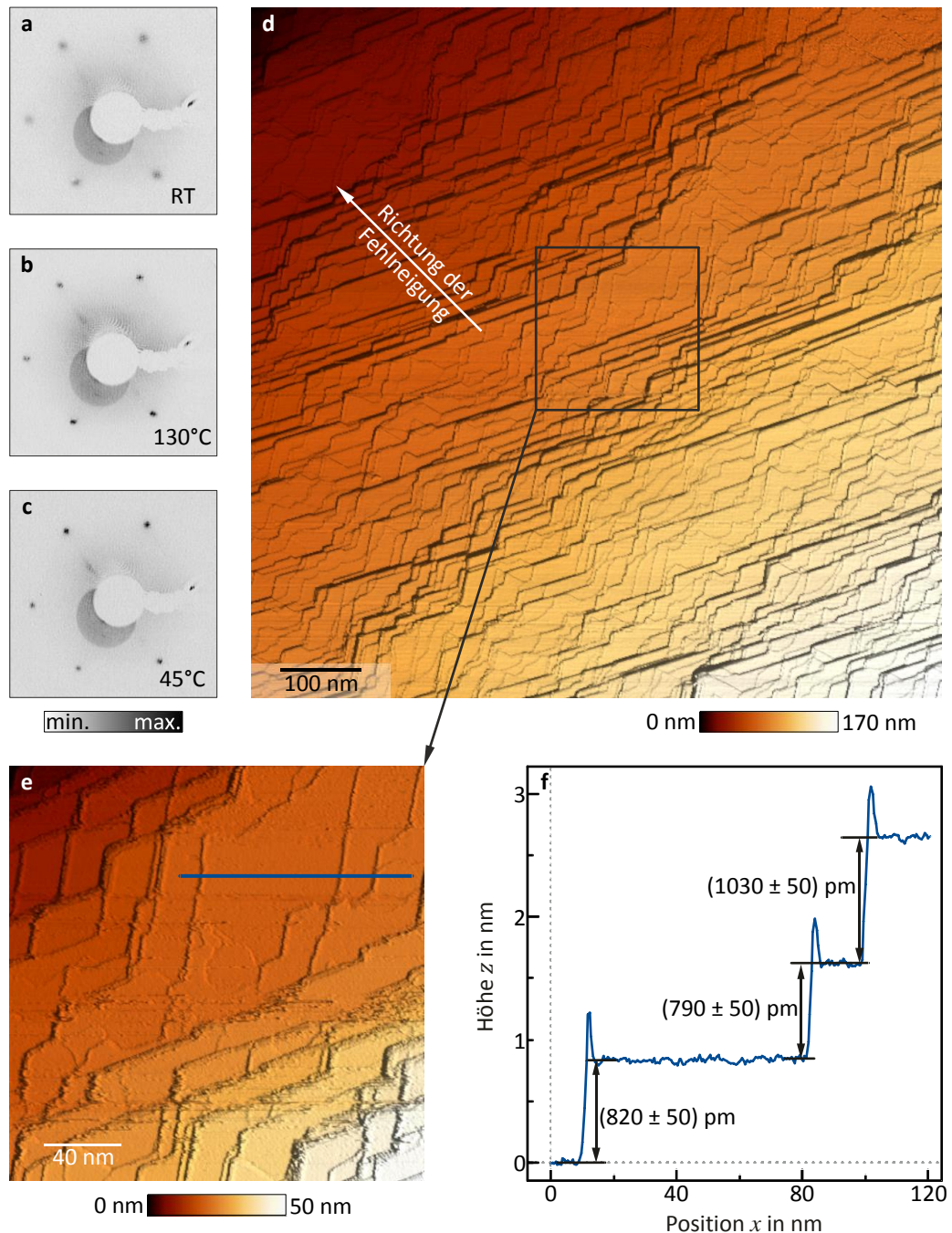


Bild 6.14 | Struktur der $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Kristalloberfläche. (a-c) LEED-Aufnahmen der Probenpräparation (Elektronenenergie 35 eV, Probentemperatur im jeweiligen LEED-Bild): Bi_2Te_3 -Film-Oberfläche (a) nach dem ersten Sputterdurchlauf, (b) nach dem Tempern auf 300°C und (c) nach dem zweiten Sputtervorgang. Der Kreis nahe der Elektronenkanone rührt von einer Entladung zwischen Leuchtschirm und Gitter her. (d-f) STM-Studie der präparierten $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Oberfläche ($V_t = 0.3$ V, $I_t = 10$ pA, Messung bei RT, Aufnahmen mit Beschattung). Dabei zeigt d eine Übersichtsaufnahme ($870 \times 870 \text{ nm}^2$) und e einen Ausschnitt ($220 \times 220 \text{ nm}^2$) der präparierten Bi_2Te_3 -Oberfläche nach dem letzten Sputterdurchlauf. In f ist ein Profil (gemittelt über 4 Scanzeilen) entlang der in e eingezeichneten Linie dargestellt. Die Zipfel an den Stufenkanten sind durch die STM-Regelung verursacht.

Daher wurde in einen zweiten Sputterdurchlauf die Probe bei RT mit Argonionen mit einer Beschleunigungsenergie von 1000 V für 60 min beschossen und anschließend für 60 min bei 300 °C ausgeheilt. Dies geschah in 6 Zyklen. Im LEED waren danach die hexagonalen Reflexe der Bi₂Te₃(111)-Oberfläche noch etwas besser sichtbar (siehe Bild 6.14c). Aus den Vergleich mit den (1×1)-Reflexen einer danach aufgenommenen Si(111)-Oberfläche ergibt sich eine Gitterkonstante des Bi₂Te₃-Kristalls von (438 ± 9) pm (Volumenwert 438 pm, vgl. Tabelle 4.2). Bild 6.14d zeigt eine Übersichtsaufnahme der Bi₂Te₃-Oberfläche. Sie weist eine starke Stufung auf, die zu einer Fehlneigung in Bild 6.14d von $(7.8 \pm 0.4)^\circ$ führt. Der Fehlwinkel ist etwa um den Faktor 14 höher als beim 14 QL Bi₂Te₃-Film in Kapitel 6.1.1, der durch das fehlgeneigte Si-Substrat einen Winkel von $(0.55 \pm 0.03)^\circ$ aufweist. Die Stufen knicken häufig auf der Oberfläche in Winkeln von etwa 60° ab, wie man sie auch in der Aufnahme der Kristalloberfläche in Bild 6.14e sieht. Dieses Erscheinungsbild der Kristalloberfläche entspricht den Erwartungen an ein hexagonales Gitter wie bei Bi₂Te₃. In Bild 6.14f ist ein Topographieprofil entlang der in Bild 6.14e eingezeichneten Linie dargestellt. Neben einer Stufenkante mit einer Höhe von (1030 ± 50) pm, die der Höhe von QL entspricht (gemäß Tabelle 4.2 $\frac{1}{3}$ der Gitterkonstante c , d. h. 1019 pm), finden sich auch zwei Stufenkanten mit einer Höhe von etwa 800 pm. Solche Stufen mit einer Abweichung von 200 pm oder dem Mehrfachen finden sich neben QL-Stufen auf der gesamten Kristalloberfläche.

Die Abweichung um rund 200 pm von der eigentlichen Stufenhöhe von QL in Bi₂Te₃ kann man durch zusätzliche Bi-BL erklären, wie man es auch für die vorliegende Probe auf Grund der hohen Ausheiltemperatur von 300 °C erwarten kann [159]. Yang et al. [148] haben mittels STM bei Bi-BL auf Bi₂Te₃ eine Höhe von etwa 470 pm bei einer Bi-BL auf Bi₂Te₃ und 870 pm bei zwei Bi-BL auf Bi₂Te₃ beobachtet, d. h., der Wert erscheint analog zu Bi₂Se₃ (siehe Kapitel 5.5.1) gegenüber dem Volumenwert von etwa 394 pm (vgl. Kapitel 4.1.2) im STM erhöht zu sein. Gemäß Steiner et al. [160] zeigen sich Bi-BL, die in die QL-Struktur des Bi₂Te₃ interkaliert sind, als 400 pm hohe Stufen auf der Bi₂Te₃-Oberfläche. In [160] wurden die interkalierten Bi-BL beim Wachstum dünner Bi₂Te₃-Filme erzeugt, indem das stöchiometrische Verhältnis Te:Bi von 1.5:1 während des Wachstums unterschritten wurde. Eine ähnliche Unterschreitung ist auch nach dem Sputtern bzw. Ausheilen der Bi₂Te₃-Volumenprobe denkbar, die zur Interkalation von Bi-BL in die Bi₂Te₃-Kristalloberfläche führt. Eine weitere Möglichkeit besteht in der unvollständigen Ausbildung von Quintupellagen, wie man sie an von Kristallen exfolierten Proben [77] und gewachsenen Filmen [161] beobachtet hat, die zu Höhenunterschieden in Schritten von 200 pm im Vergleich zu vollständig ausgebildeten QL führen.

Da in den vorliegenden STM-Messungen im Rahmen der Messauflösung die vorhandenen Terrassen weder topographisch noch spektroskopisch genauer charakterisiert und unterschieden werden konnten, bleibt die Frage nach der Ursache bzw. dem Aufbau der Sub-Quintupelstufen auf der Oberfläche des Bi₂Te₃-Kristalls in den vorliegenden Untersuchung offen.

6.3.2 4PP-Messung

Zur Untersuchung der globalen Leitungseigenschaften des Bi_2Te_3 -Kristalls wurde wie in Kapitel 6.1.3 und 6.2.2 eine abstandsabhängige 4PP-Messung durchgeführt (siehe Bild 6.15). Dafür wurde eine lineare 4PP-Messung mit dem Spitzenabstand $a = (100 \pm 10) \mu\text{m}$ gewählt und die Position einer stromführenden Spitze in Richtung der linearen 4PP-Messung variiert (Strecke s in Bild 6.15b). Für jeden Schritt wurde der Vierpunkt Widerstand V/I gemessen. In Bild 6.15a ist V/I gegen s aufgetragen: Der Vierpunkt Widerstand V/I der Kristallprobe ist sehr gering, wie man anhand der kleinen Werte von etwa 0.02 - 0.06Ω für die Abstände von etwa 75 - $420 \mu\text{m}$ erkennt. Es konnten lediglich vier Messwerte V/I bestimmt werden, da, durch den geringen Vierpunkt Widerstand bedingt, hohe Probenströme I mit sehr kleinen Messspannungen V auftraten, die nahe an der Auflösung der Messelektronik lagen (vgl. Bild 9.18 in Kapitel 9.3.2), wie auch die entsprechenden Fehlerbalken zeigen. Allein der geringe Vierpunkt Widerstand ist ein Hinweis darauf, dass die elektrische Leitung in der Probe nicht durch eine dünne Schicht an der Kristalloberfläche – respektive dem topologischen Oberflächenzustand – getragen wird, sondern durch das Kristallvolumen. An die Messpunkte wurde sowohl der Fall einer Schichtleitung (2D, Gleichung (2.54)) als auch der Fall einer Volumenleitung (3D, Gleichung (2.55)) angefitet. Wie zu erwarten, ist im Vergleich die Anpassung durch den Volumenleitungsfit deutlich besser als durch den Schichtleitungsfit. Der durch den Volumenleitungsfit bestimmte Wert der Volumenleitfähigkeit beträgt $\sigma = (800 \pm 200) \text{ S/cm}$ und liegt im Bereich dessen, was MTI für den vorliegenden Bi_2Te_3 -Kristall als Bereich der Volumenleitfähigkeit angibt (um 1000 S/cm).

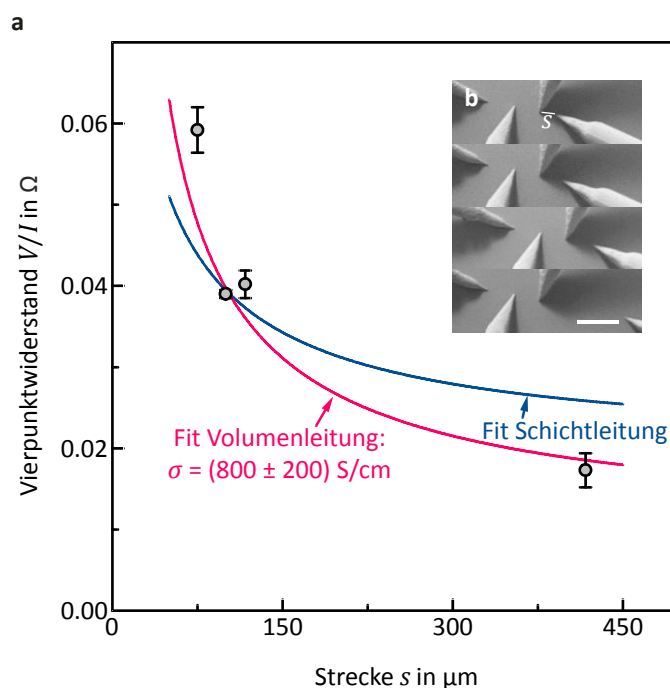


Bild 6.15 | Abstandsabhängige 4PP-Messung auf der Bi_2Te_3 -Kristalloberfläche. (a) Auftragung des Vierpunkt Widerstands V/I gegen dem Betrag der variierten Strecke s . Abstand der anderen Spitzen zueinander $a = (100 \pm 5) \mu\text{m}$. (b) SEM-Aufnahmen der 4PP-Messung. Der weiße Balken repräsentiert eine Länge von $200 \mu\text{m}$.

6.3.3 STP-Messung

Bild 6.16 zeigt eine SEM-Aufnahme der benutzten Kontaktgeometrie für die STP-Messung auf der Bi₂Te₃(111)-Kristalloberfläche. Der Abstand der Kontaktspitzen beträgt $d = (265 \pm 15) \mu\text{m}$, wobei die Tunnelspitze sich mittig zwischen den Kontaktspitzen befindet. Nach Gleichung (5.3) lässt sich gemäß dem gefundenen Volumenleitcharakter (Kapitel 6.3.2) der Betrag der (hier dreidimensionalen) Stromdichte zu $j_{3D} = 4I_{\text{quer}}/(\pi d^2)$ am Ort der Tunnelspitze abschätzen.

In Bild 6.17 ist eine zugehörige STP-Messung gezeigt. Die Stromrichtung innerhalb der Messung verläuft entlang der schnellen Scanrichtung. Der Querstrom während der Messung betrug $I_{\text{quer}} = 2 \text{ mA}$. Damit ergibt sich der abgeschätzte Betrag der lokalen Stromdichte zu $j_{3D} = (3.6 \pm 0.5) \text{ A/cm}^2$, wobei j_{3D} hier entlang der Oberfläche in Richtung der schnellen Scanrichtung zeigen sollte. Die Topographie (Bild 6.17b) wird durch eine recht hohe Mehrfachstufe in der Bildmitte durchschnitten, von der Stufenkanten in einem Winkel von 60° wegnicken, wie man es auch zuvor bei der STM-Studie in Bild 6.14d-f sehen konnte. Das zugehörige Potential (Bild 6.17b) zeigt keinen erkennbaren Gradienten (Auflösung/Rauschen in der Potentialaufnahme ca. $25 \mu\text{V}$). Es finden sich allerdings Potentialsignale im Bereich von $150\text{--}350 \mu\text{V}$, die mit bestimmten morphologischen Strukturen verbunden sind (vgl. Bild 6.17a). So sieht man anhand der Profile in Bild 6.17d und Bild 6.17e, dass die Spannungssignale an bestimmten Terrassen (Bereich (i)) sowie sehr steilen Stufenkanten (Bereich (ii)) auftreten. Die Signale sind unabhängig von der Scanrichtung (vgl. Bild 6.17e) und der Stromrichtung (vgl. Bild 6.18, Stromrichtung gegenüber Bild 6.17 umgekehrt). Die Spannungssignale sind daher kein Artefakt der STM-Regelung oder durch eine Doppelspitze bedingt, sondern es handelt sich wahrscheinlich um Thermospannungssignale. In Bild 6.18 sind vornehmlich Thermospannungssignale auf den Terrassen zu sehen. Anhand der Profile in Bild 6.18d und Bild 6.18e wird außerdem ersichtlich, dass die Thermospannungssignale zumindest teilweise mit Sub-QL-Stufen korreliert zu sein scheinen (siehe Bereich (ii) und (iii), Höhenangabe auf Grund des Messrauschens manchmal unsicher).

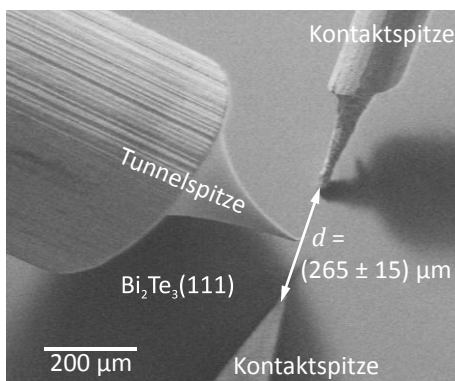


Bild 6.16 | STP-Geometrie. SEM-Aufnahme der Kontaktgeometrie für die STP-Messung bei RT auf der Bi₂Te₃(111)-Volumenprobe. Bild ähnlich zu [150].

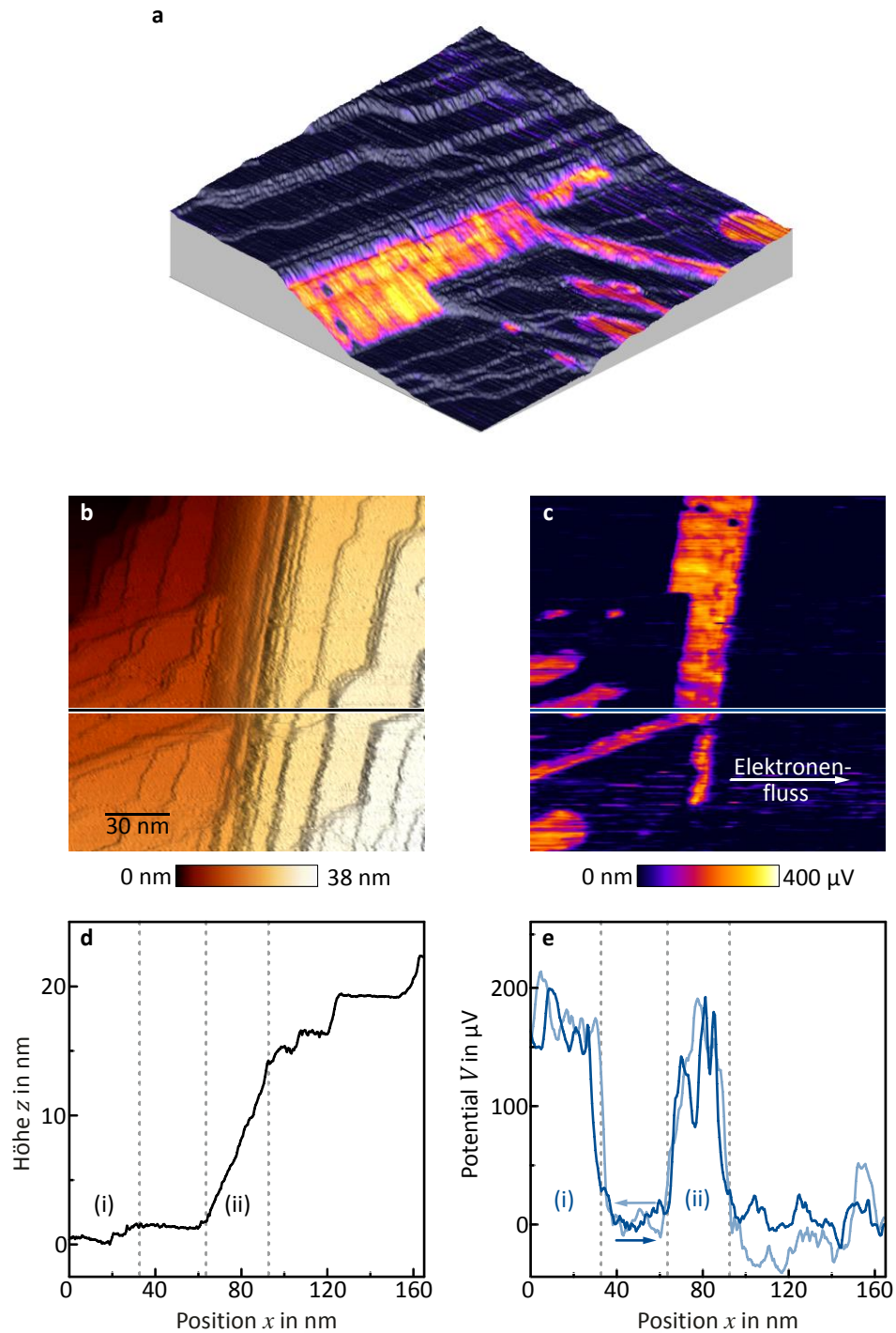


Bild 6.17 | STP-Messung auf der $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Oberfläche. Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 4 \text{ mV}_{\text{pp}}$ bei 2.113 kHz, $I_t = 10 \text{ pA}$, $165 \times 165 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = -0.20 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -2.0 \text{ mA}$. (a) 3D-Darstellung der Topographie in **b** mit überhöhter z-Wiedergabe. Die Farbgebung der Oberfläche entspricht dem Potential der Oberfläche in **c**. (b) Topographie (Aufnahme mit Beschattung). (c) Simultan zu **b** gemessenes Potential. (d) Profil der Topographie entlang der in **b** eingezeichneten Linie. (e) Profil des Potentials mit Scanrückrichtung in blässerer Farbe an der gleichen Stelle wie in **d**. Alle Profile stellen einzelne Scanlinien dar.

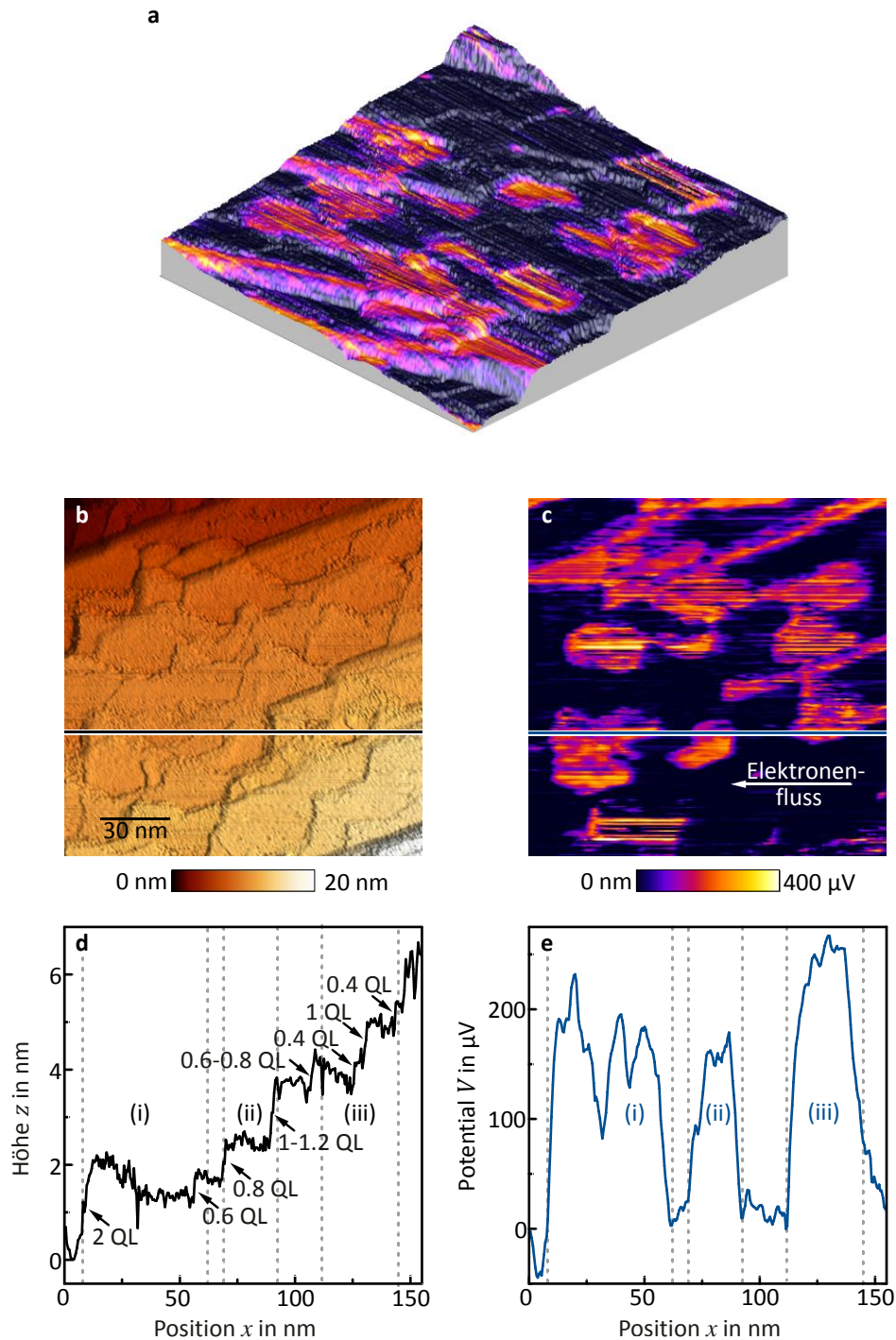


Bild 6.18 | STP-Messung auf der Bi₂Te₃(111)-Oberfläche. Messung bei RT mit $V_{\text{mod}} = 4 \text{ mV}_{\text{pp}}$ bei 2.113 kHz, $I_t = 10 \text{ pA}$, $155 \times 155 \text{ nm}^2$, $V_{\text{quer}} = +0.20 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = +2.0 \text{ mA}$. (a) 3D-Darstellung der Topographie in **b** mit überhöhter z -Wiedergabe. Die Farbgebung der Oberfläche entspricht dem Potential der Oberfläche in **c**. (b) Topographie (Aufnahme mit Beschattung). (c) simultan zu **b** gemessenes Potential. (d) Profil der Topographie entlang der in **b** eingezeichneten Linie. (e) Profil des Potentials an der gleichen Stelle wie in **d**. Alle Profile stellen einzelne Scanlinien dar.

6.3.4 Diskussion

Mittels der 4PP-Messung in Kapitel 6.3.2 konnte für den $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Kristall gezeigt werden, dass die elektrische Leitung durch das Kristallvolumen getragen wird. Die Leitfähigkeit der Kristallprobe wurde mit $\sigma = (800 \pm 200) \text{ S/cm}$ im Rahmen der Herstellerangabe gefunden (um 1000 S/cm). Die hier gefundene Leitfähigkeit des $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Kristalls kann mit dem Leitwertbereich des 14 QL Bi_2Te_3 -Films aus Kapitel 6.1 verglichen werden ($1.2\text{--}2.3 \text{ mS}$). Gemäß Gleichung (4.7) gilt für den Leitwert $G = \sigma \cdot t + \sigma_{2D}$. Benutzt man für den Vergleich die ermittelte Leitfähigkeit $\sigma = 800 \text{ S/cm}$ des $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Kristalls, die Schichtdicke $t = 14 \text{ nm}$ des Bi_2Te_3 -Films aus Kapitel 6.1 und die Leitfähigkeit des topologischen Oberflächenzustands $\sigma_{2D} = 0.7 \text{ mS}$ nach Hoefer et al. [87], erhält man $G = 1.8 \text{ mS}$. Dies liegt in dem Bereich der Leitwerte des 14 QL Bi_2Te_3 -Films, d. h. die Kristallprobe scheint vergleichbare elektrische Eigenschaften wie der gewachsene Film aufzuweisen.

Lokal konnte mittels STP keine Leitfähigkeit bestimmt werden, da im Rahmen des Messrauschens (ca. $25 \mu\text{V}$) kein Gradient ersichtlich war (Länge der Aufnahmen etwa 150 nm). Der Betrag der 3D-Stromdichte wurde für die Messungen in Bild 6.17 und Bild 6.18 zu etwa $j_{3D} = (3.6 \pm 0.5) \text{ A/cm}^2$ abgeschätzt. Die Richtung liegt gemäß der Abschätzung entlang der schnellen Scanrichtung parallel zur Oberfläche. Aus dem Ohmschen Gesetz $j_{3D} = \sigma \cdot E$ folgt daher mit der Leitfähigkeit des Bi_2Te_3 -Kristalls σ für das zu erwartende elektrische Feld während der Messung $E = j_{3D}/\sigma = 4.5 \times 10^{-3} \text{ V/cm}$. Berechnet man die zu erwartende Spannungsdifferenz entlang der schnellen Scanrichtung (ca. 150 nm) in Bild 6.17 und Bild 6.18, ergibt sich nur 70 nV , was weit kleiner ist als das vorhandene Rauschen im Potential (ca. $25 \mu\text{V}$). In Kapitel 6.1.4 konnte beim 14 QL Bi_2Te_3 -Film mit einem kleinerem Querstrom von etwa $I_{\text{quer}} = 0.77 \text{ mA}$ (hier $I_{\text{quer}} = 2 \text{ mA}$) ein im Vergleich zu hier deutlich größerer Gradient von $E = (18.3 \pm 0.2) \text{ V/cm}$ erreicht werden.

Jedoch konnten für die $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ -Volumenprobe lokal Thermospannungssignale mit einem Wert von etwa $150\text{--}250 \mu\text{V}$ auf der Oberfläche gefunden werden. Wie in Kapitel 5.2.4 soll die Temperaturdifferenz ΔT zwischen Probe und Spitze abgeschätzt werden, die infolge der durch den Querstrom $I_{\text{quer}} = 2 \text{ mA}$ und die Querspannung $V_{\text{quer}} = 0.2 \text{ V}$ in die Probe hineingetragenen Leistung $P = V_{\text{quer}} \cdot I_{\text{quer}} = 0.4 \text{ mW}$ entsteht. Die Kristallprobe ist $10 \times 10 \times 1 \text{ mm}^3$ groß. Für die Temperaturabschätzung werde die elektrische Leistung in die Fläche $A = 10 \times 1 \text{ mm}^2$ in der Mitte der Probe in Wärme umgewandelt und von dort aus über thermische Leitung an die Stirnflächen der Probe in $d = 5 \text{ mm}$ Entfernung zu den Haltebügeln des Probehalters abgeleitet. Im Gegensatz zu den vorherigen Abschätzungen kann hier nur das Bi_2Te_3 die Wärme ableiten, das einen deutlich kleineren Wärmeleitungskoeffizienten $\kappa = 0.018 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [125] als Silicium ($\kappa = 1.48 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63]) hat. Mit Gleichung (5.6) ergibt sich dann eine Temperaturdifferenz von $\Delta T = P/2 \cdot d/(A \cdot \kappa) = 0.55 \text{ }^\circ\text{C}$. Diese abgeschätzte Temperaturdifferenz ist der bisher größte abgeschätzte Wert im Vergleich zu Kapitel

5.2.4 (0.07 °C), Kapitel 5.5.4 (0.03 °C) und Kapitel 5.2.4 (0.01 °C), wobei der Wert nur eine untere Grenze darstellt: Entgegen der Abschätzung wird die elektrische Leistung in einem viel kleineren Bereich zwischen den Kontaktspitzen dissipiert (Abstand der Spitzen ca. 265 µm). Da der Wärmeleitungskoeffizient κ von Bi₂Te₃ so klein ist, kann anscheinend trotz der hohen Probengröße ein recht großer Temperaturgradient zwischen Spitze und Probe alleine auf Grund der Energiedissipation in Folge des Probenquerstroms erzeugt werden.

Gemäß Gleichung (2.41) wird die Höhe der Thermospannung V_{th} neben der Temperaturdifferenz zwischen Spitze und Probe auch von der Variation der normierten Ableitung der Proben-LDOS $D_p(E)$ am mittleren chemischen Potential μ zwischen Spitze und Probe bestimmt: $V_{th} \sim D'_p(\mu)/D_p(\mu)$. Die hier beobachteten Thermospannungssignale sind mit sehr steilen Kantenverläufen und zum Teil mit Sub-QL-Stufen korreliert. In Kapitel 6.3.1 wurden folgende mögliche Ursachen für das Vorhandensein von Sub-QL in Bi₂Te₃ benannt: Bi-BL auf der Bi₂Te₃-Oberfläche, in die Bi₂Te₃-Struktur interkalierte Bi-BL und unvollständig ausgebildete QL des Bi₂Te₃. Für das System Bi/Bi₂Te₃ konnten F. Yang et al. [148] mittels STS-Messungen zeigen, dass sich der energetische Verlauf der LDOS auf dem Bi-BL sich von dem der LDOS auf der reinen Bi₂Te₃-Oberfläche unterscheidet, d. h., hierdurch könnte sich ein Unterschied in der Thermospannung zwischen der reinen Bi₂Te₃-Oberfläche und den aufliegenden Bi-BL ergeben. Auch die in die Bi₂Te₃-Oberfläche interkalierten Bi-BL könnten zu einer Veränderung der Thermospannung auf der Oberfläche führen. So erzeugten z. B. Seifritz et al. [162] durch Interkalation von SeCl₄ in das Schichtmaterial Graphit Thermospannungsunterschiede auf der Graphitoberfläche. Unvollständige QL haben auf ihrer Oberfläche eine gegenüber geschlossenen QL veränderte LDOS (vgl. [77] und [161]), die auch zu Thermospannungssignalen führen könnte.

Die steilen Kanten können durch mehrfache Sub-QL gebildet sein und daher folglich zu den gleichen Thermospannungssignalen wie auf den Terrassen führen. Andererseits war z. B. bei Bild 6.17d (Bereich (ii)) auffällig, dass die Stufenkante praktisch glatt abgebildet wird, ohne dass einzelne Lagen im Topographieprofil zu sehen sind, aus denen sich die Stufenkante bilden müsste. In der Topographie konnten allerdings andere Stufen mit einem steileren Verlauf abgebildet werden. Daher sollte es sich im Bereich (ii) nicht einfach um das Abbild der Tunnelspitze an der Stufenkante handeln (vgl. Kapitel 2.1.4), sondern die Oberfläche könnte wirklich so steil verlaufen, d. h. es handelt sich möglicherweise um eine Art Facette bzw. andere Oberfläche des Bi₂Te₃(111)-Kristalls. An ähnlich stark geneigten Stufenkanten auf polykristallinen Silber- und Kupferfilmen sowie Ag(111) wurden auch recht starke Thermospannungssignale wie hier gefunden [163], wobei man die Ursache dort bisher nicht verstanden hat.

Insgesamt bleiben die Ursache der Thermospannungssignale sowie der Aufbau der mit ihnen korrelierten morphologischen Strukturen (Terrassenbereiche und steile Stufenkanten auf der Bi₂Te₃(111)-Oberfläche) offen.

7 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht die nanoskopischen Transporteigenschaften der Materialien Bismutselenid (Bi_2Se_3)- und Bismuttellurid (Bi_2Te_3). Bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 handelt es sich um topologische Isolatoren (TI), die auf ihrer Oberfläche einen topologischen Oberflächenzustand (TSS) ausbilden. Der TSS ist metallisch und spinpolarisiert, wobei er gegenüber trivialen (nicht-topologischen bzw. „normalen“) Systemen weniger Möglichkeiten für die elastische Streuung von Leitungselektronen bietet. Im Vergleich zueinander gestattet der TSS in Bi_2Te_3 mehr elastische Streukanäle als der TSS in Bi_2Se_3 .

Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 setzen sich aus sogenannten Quintupellagen (QL) zusammen, die die Kristallstruktur der beiden Materialien bilden. In der vorliegenden Arbeit konnte durch Molekularstrahlepitaxie in situ dünne Filme aus Bi_2Se_3 (4.5 QL-16 QL) und Bi_2Te_3 (14 QL) hergestellt werden. Zudem konnte die Oberflächenstruktur der Filme mittels Aufdampfen von Bismut (für Bi_2Se_3) und Eisen (für Bi_2Te_3) manipuliert werden. Ergänzend zu den dünnen Filmen wurden noch die α -Phase der $\text{Si}(111)\text{-(}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{)R}30^\circ\text{-Bi}$ -Rekonstruktion (Substrat für die Bi_2Se_3 -Filme) sowie eine Bi_2Te_3 -Volumenprobe präpariert. Alle Proben wurden bei Raumtemperatur lokal (nm-Skala) mittels Rastertunnelpotentiometrie (STP) untersucht, wobei die STP-Messungen durch globale (μm -Skala) Mehrspitzenmessungen (MPM) unterstützt wurden. Bei der STP wird die Probe von einem lateralen Strom durchflossen und mittels einer Tunnelspitze zeitgleich die Topographie und das lokale Potential der Probenoberfläche erfasst.

Für die Bi_2Se_3 -Filme wurde unabhängig von den Schichtdicken (4.5-16 QL) bei Raumtemperatur als lokales Potential der Probenoberfläche vornehmlich ein konstanter Gradient bzw. elektrisches Feld gemessen. Der konstante Gradient weist auf Phononenstreuung hin, wie man sie für Bi_2Se_3 bei Raumtemperatur auch erwartet. Aus dem mittleren Gradienten auf den Filmoberflächen konnten lokal Schichtleitwerte im Bereich von etwa 0.1 mS (4.5 QL-Film) bis etwa 9.3 mS (16 QL-Film) ermittelt werden, die durch die entsprechenden MPM in ihrer Größenordnung bestätigt wurden (0.3 mS für 4.5 QL-Film bis 7.0 mS (16 QL-Film)). Abweichungen zwischen lokalen und globalen Werten lassen sich durch die Unsicherheit der Stromdichteabschätzung bei der STP sowie durch Inhomogenitäten der präparierten Proben erklären. Durch Aufdampfen von Bismut auf die Bi_2Se_3 -Oberfläche konnte die Leitfähigkeit des Bi_2Se_3 -Films um den Faktor 3 gesteigert werden, wobei vermutlich zusätzliche Ladungsträger aus der Grenzschicht $\text{Bi/Bi}_2\text{Se}_3$ die Erhöhung verursachen. Zusätzlich zu den Bi_2Se_3 -Filmen wurde die α -Phase der $\text{Si}(111)\text{-(}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{)R}30^\circ\text{-Bi}$ -Rekonstruktion untersucht, die auch das Substrat für die hier präparierten Bi_2Se_3 -Filme bildet. Da anhand der STP-Messung und der MPM kein eindeutiges Ergebnis erzielt werden konnte, wurde durch Vergleich mit Literaturdaten der β -Phase festgestellt, dass die Leitfähigkeit der α -Phase unterhalb von 0.03-0.05 mS liegt und damit deutlich kleiner ist als bei den hier präparierten Bi_2Se_3 -Filmen. Daher scheint die α -Phase

der Bi-Rekonstruktion – falls sie bei der Präparation erhalten bleibt – nur eine untergeordnete Rolle für den Stromtransport in Bi_2Se_3 -Filmen zu spielen.

Für Bi_2Te_3 (14 QL) wurde analog auf lokaler Ebene vor allem ein konstanter Gradient gefunden, der auf Phononenstreuung hinweist, wie man es bei Raumtemperatur auch für Bi_2Te_3 erwartet. Dabei wurde ein Schichtleitwert von etwa 1.3 mS ermittelt. Die globalen Schichtleitwerte liegen mit 1.2-2.3 mS in derselben Größenordnung wie der lokale Wert, wobei die Streuung der Werte auf eine Inhomogenität der elektrischen Eigenschaften des Bi_2Te_3 -Films hindeuten könnte. Durch Aufdampfen von Eisen wurde versucht, den TSS in Bi_2Te_3 bzw. die Leitungseigenschaften des Bi_2Te_3 -Films zu verändern. Im Rahmen der Streuung der Messwerte vor dem Aufdampfen (1.2-2.3 mS) und danach (1.7-2.2 mS) konnte in Einklang mit der Literatur keine signifikante Veränderung gefunden werden.

Zuletzt wurde eine Volumenprobe aus Bi_2Te_3 untersucht. In der MPM konnte ein Verhalten einer 3D-Leitung gezeigt werden (Leitfähigkeit $\sigma = 800 \text{ S/cm}$). In der STP-Messung konnte im Rahmen der gegebenen Messauflösung der (rein rechnerisch winzige) Gradient nicht beobachtet werden.

Neben einem Gradienten wurden auf den Proben zum Teil zusätzliche Signale in Form von Thermospannung gefunden. Für die Thermospannung V_{th} müssen Spitze und Probe eine Temperaturdifferenz aufweisen. Außerdem ist die Thermospannung sensitiv auf Veränderungen der normierten Ableitung der Proben-LDOS $D_p(E)$ am mittleren chemischen Potential μ zwischen Spitze und Probe: $V_{\text{th}} \sim D'_p(\mu)/D_p(\mu)$. Dies bedeutet, dass die zu den Thermospannungssignalen gehörigen Probenbereiche eine entsprechend veränderte LDOS aufweisen sollten. Für die Bi_2Te_3 -Volumenprobe waren die Thermospannungssignale mit bestimmten Terrassenbereichen und Stufenkanten verbunden. Jedoch konnte die Morphologie dieser Stellen im Rahmen der Studie nicht geklärt werden, sodass die genaue Ursache für die Thermospannung offen bleibt. Für das System $\text{Bi}/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ konnten mit den auf der Oberfläche platzierten Bi-Inseln korrelierte Thermospannungssignale gefunden, die wahrscheinlich auf die veränderte LDOS auf den Bi-Inseln zurückzuführen ist. Für das System $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ konnten keine signifikanten Signale an den Fe-Inseln beobachtet werden. Auf den reinen Filmoberflächen von Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 wurden teilweise Thermospannungssignale beobachtet: Auf dem 4.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film und dem 14 QL-dicken Bi_2Te_3 -Film traten die Thermospannungssignale an QL-Stufenkanten auf.

Neben den Thermospannungssignalen konnten abhängig von der vorhandenen Messauflösung Spannungssprünge an QL-Stufen und Domänengrenzen bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 beobachtet werden, die daher Transportbarrieren für die Leitungselektronen darstellen. Mittels STP-Messung konnte für den 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film die Leitfähigkeit einer 1 QL-Stufe mit $(1080 \pm 540) \text{ S/cm}$ im TSS bestimmt werden. Dieser Wert konnte in seiner Größenordnung durch eine quadratische 4PP-Messung auf einer gestuften Bi_2Se_3 -Oberfläche (16 QL dicker Film) mit $(740 \pm 330) \text{ S/cm}$ bestätigt werden. Zudem konnte für eine 3 QL-Stufe mittels STP eine Leitfähigkeit von $(310 \pm 190) \text{ S/cm}$ ermittelt werden, d. h. der Widerstand der QL-Stufen scheint zumindest für niedrige Höhen linear mit der Zahl

der vorhandenen QL zu steigen. Auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche (14 QL dicker Film) wurde eine Leitfähigkeit von 1 QL-Stufen von $(800 \pm 330) \text{ S/cm}$ mittels STP-Messung bestimmt. Die bei Bi_2Te_3 ermittelte Leitfähigkeit ist niedriger als bei Bi_2Se_3 , wie man es auch auf Grund der höheren Zahl an Streukanälen im TSS von Bi_2Te_3 erwartet.

Die für 1 QL-Stufen auf der Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Oberfläche gefundenen Werte werden durch eine Messung von Lüpke et al. [114] am System $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ auf Si(111) bestätigt, wobei die Messungen ein Jahr nach der Publikation der hier gezeigten Daten zum 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film [37] veröffentlicht wurden. Das System $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ ist sehr interessant, da es sich um einen 3D TI mit der gleichen QL-Kristallstruktur wie bei Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 handelt (1 QL etwa 1 nm). Aus ARPES-Messungen wurde bei Lüpke et al. ersichtlich, dass der etwa 9 QL dicke $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ -Film als TSS einen Dirac-Kegel hat, dessen Dirac-Punkt sich innerhalb der Bandlücke von etwa 0.26 eV befindet (ähnliche Struktur wie in Bi_2Se_3). Das chemische Potential des Films liegt zudem auch innerhalb der Bandlücke im TSS. Mittels ARPES wurde bei Lüpke et al. eine Leitfähigkeit des TSS auf der Oberfläche des $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ -Films von $\sigma_s = (0.32 \pm 0.11) \text{ mS}$ ermittelt, während der Leitwert des Films über MPM mit $G = (0.44 \pm 0.05) \text{ mS}$ bestimmt wurde. Hieraus ergibt sich ein Anteil des TSS auf der Oberfläche zum elektrischen Gesamttransport in $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ von $\sigma_s/G = 70 \%$. Der verbleibende Teil von weniger als 30 % beinhaltet vornehmlich die Leitfähigkeit des TSS an der Grenzfläche zum Si-Substrat sowie mögliche Volumenbeiträge. Somit konnte durch Lüpke et al. die Leitfähigkeit des TSS auf der Oberfläche und damit sein Anteil am Gesamttransport sehr genau bestimmt werden. Mittels STP-Messungen, ähnlich denen in dieser Arbeit, fanden Lüpke et al. [114] Spannungssprünge an QL-Stufen sowie Domänengrenzen auf der $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ -Oberfläche. Es ergibt sich eine Leitfähigkeit für die 1 QL-Stufen im TSS von $(910 \pm 250) \text{ S/cm}$. Das Ergebnis stimmt im Rahmen seiner Grenzen mit dem hier für Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 ermittelten Werten gut überein.

Um die zuvor vorgestellten Leitfähigkeiten der QL-Stufen im TSS der 3D TI Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 und $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ einschätzen zu können, sind sie in Tabelle 7.1 der Stufenleitfähigkeit in den trivialen Systemen Si(111)-(7×7) und Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{R}30^\circ\text{-Ag}$ sowie dem zum TSS ähnlichen System Graphen auf SiC(0001) gegenübergestellt. Die Leitfähigkeit der Stufen in den trivialen Systemen ist um ein bis drei Größenordnungen kleiner als bei den 3D TI, vermutlich auf Grund der erlaubten Rückstreuung in diesen Systemen. Besonders prototypisch ist dabei die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ -Rekonstruktion, da sie elektronisch ein fast ideales zweidimensionales Elektronengas (2DEG) ausbildet, das vom Si(111)-Substrat nahezu vollständig entkoppelt ist. Stufenkanten oder Domänengrenzen wirken dabei als recht starke Transportbarrieren. Die von Homoth et al. [108] gefunden Leitfähigkeiten für Einzel- und Mehrfachstufen auf der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ -Rekonstruktion sind dabei um ein bis zwei Größenordnungen niedriger als bei den zuvor vorgestellten 3D TI. Zudem ist die Stufenleitfähigkeit bei der Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ -Rekonstruktion abhängig von der Stromrichtung zu den Stufenkanten.

Tabelle 7.1 | Stufenleitfähigkeit σ_{st} für verschiedene 2D-Systeme. In der Tabelle sind zum Vergleich die Stufenleitfähigkeit auf der Oberfläche von trivialen Systemen (reine Si(111)-Oberfläche sowie Ag-Rekonstruktion auf Si(111)), von Graphen als TI-ähnlichem System und der drei 3D TI Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 und $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ angegeben. Folgende Kürzel werden benutzt: Mehrpunktmesung (M) und Tunnelpotentiometrie-Messung (STP).

System	Ref.	σ_{st} in S/cm	Methode	Bemerkung/Spezifikation
Si(111)-(7×7)	[106]	0.15 ± 0.07	M	
	[107]	29 ± 9	M	
Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Ag	[108]	50 ± 6	STP	Si ohne Fehlneigung, Einzelstufe
		< 3	STP	0.5°-Fehlneigung, Einzelstufe, Stromfluss parallel zur Stufe
		< 0.4	STP	0.5°-Fehlneigung, Mehrfachstufe, Stromfluss parallel zur Stufe
		32 ± 5	STP	0.5°-Fehlneigung, Einzelstufe, Stromfluss senkrecht zur Stufe
		7 ± 3	STP	0.5°-Fehlneigung, Mehrfachstufe, Stromfluss senkrecht zur Stufe
	[109]	30	M	1.8°-Fehlneigung, Einzelstufe
Graphen auf SiC(0001)	[110]	1400 ± 500	STP	SiC-Einzelstufe
		700 ± 200	STP	SiC-Doppelstufe
		400 ± 100	STP	SiC-Dreifachstufe
$(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ auf Si(111)	[114]	910 ± 250	STP	9 QL-Film, σ_s gemessen
Bi_2Se_3 auf Si(111)	(hier)	1080 ± 540	STP	Einzelstufe, vgl. Kapitel 5.3.5
		740 ± 330	M	Einzelstufe, vgl. Kapitel 5.4.5
		310 ± 190	STP	Dreifachstufe, vgl. Kapitel 5.3.5
Bi_2Te_3 auf Si(111)	(hier)	800 ± 330	STP	Einzelstufe, vgl. Kapitel 6.1.6

Die Leitfähigkeit der Stufen für einen Stromfluss parallel zu den Stufenkanten ist um etwa eine Größenordnung kleiner als bei einem Stromfluss senkrecht zu den Stufenkanten. In [108] wurde dieser Unterschied mit der Transmission der Stufenkanten erläutert: Die Elektronentransmission der Stufenkante ist maximal für Elektronen, die sich senkrecht zur Stufenkante bewegen, und nimmt für immer schräger einfallende Elektronen deutlich ab, sodass die Leitfähigkeit entsprechend abnimmt. Dies konnte für die 3D TI in dieser Arbeit nicht beobachtet werden. Die hohe Leitfähigkeit der Stufenkanten bei den 3D TI gegenüber den trivialen Systemen erscheint aus folgendem Grund sinnvoll: Die Eindringtiefe des TSS bei den 3D TI beträgt mehrere Nanometer, sodass alleine hierdurch eine hohe Überlappung zwischen dem TSS auf der oberen und dem TSS auf der unteren Terrasse an der Stufenkante (ca. 1 nm hoch) stattfindet. Entsprechend bildet die Stufenkante nur eine kleine Transportbarriere. Dies zusammen mit der unterdrückten Rückstreuung an den QL-Stufen im TSS der 3D TI macht die gegenüber den trivialen Systemen höhere Leitfähigkeit der 1 QL-Stufen plausibel.

Sehr interessant ist die Stufenleitfähigkeit des zu den 3D TI ähnlichen Systems Graphen: Es weist auf seiner Oberfläche ähnlich den 3D TI Dirac-Kegel auf, die an den K-Punkten der Brillouinzone Valenz- und Leitungsband miteinander verbinden [164]. Die Dirac-Kegel sind dabei allerdings nicht durch die Topologie der Bandstruktur, sondern durch ihre Symmetrie bedingt [3]. Ji et al. [110] ha-

ben mittels STP den nanoskopischen Elektronentransport einer Graphenlage auf SiC(0001) untersucht. Dabei verursachen SiC-Stufen (Höhe einer Einzelstufe ca. 0.5 nm) in dem aufliegenden Graphen-Film Stufenkanten, die für den Elektronentransport in der Graphenlage wie Transportbarrieren wirken. Die entsprechenden Leitfähigkeiten der durch die SiC-Stufen induzierten Graphenstufen liegt im gleichen Bereich wie die bei den 3D TI vorgefundenen Werte. Dabei skalieren die Werte für die Stufenleitfähigkeit in Graphen in etwa linear mit der Höhe der zugrunde liegenden SiC-Stufen. Eine ähnliche lineare Abhängigkeit scheint es zumindest bei Bi_2Se_3 für QL-Stufen zu geben. Vergleicht man Stufenkanten mit der gleichen Höhe bei Graphen und den 3D TI (Graphenlage auf einer Doppel-SiC-Stufe im Vergleich zu einer 1 QL-Stufe bei $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$, Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3), so ist die Stufenleitfähigkeit bei den 3D TI höher, d.h. die QL-Stufenkanten haben einen geringeren Einfluss auf den Elektronentransport als die gleichhohen, durch das SiC-Substrat induzierten Graphenstufen.

Spannungssprünge konnten in dieser Arbeit nicht nur an Stufenkanten, sondern auch an Domängengrenzen (DG) in Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 ermittelt werden. Dabei wurde die DG zunächst wie Liniendefekte behandelt und ihr eine entsprechende Leitfähigkeit σ_{DG} zugeordnet (etwa 4500 S/cm für den gestuften 16 QL dicken Bi_2Se_3 -Film und (640 ± 200) S/cm für den 14 QL dicken Bi_2Te_3 -Film). Die DG sind eigentlich keine Liniendefekte, sondern erstrecken sich wahrscheinlich durch das gesamte Filmvolumen. Daher setzt sich die in dieser Arbeit definierte DG-Leitfähigkeit σ_{DG} analog zum Filmleitwert G aus einem Volumenanteil $\sigma_{\text{DG,V}}$ sowie einem Anteil $\sigma_{\text{DG,S}}$ des TSS zusammen:

$$\sigma_{\text{DG}} = \sigma_{\text{DG,V}} \cdot t + \sigma_{\text{DG,S}} \quad (7.1)$$

Im ersten Schritt würde man erwarten, dass das Verhältnis $\sigma_{\text{DG,S}}/\sigma_{\text{DG,V}}$ der Aufteilung des Stroms im Volumen und im TSS entspricht, die durch $\sigma_s/(G - \sigma_s)$ mit σ_s als Leitfähigkeit des TSS gegeben ist. Da sich allerdings die elektronische Struktur im TSS und im reinen Volumen recht stark voneinander unterscheidet, muss die Aufteilung des Stroms auf das Volumen und auf den TSS nicht so gegeben sein. Für die ermittelten Werte wurde daher auch in Analogie zur Leitfähigkeit der QL-Stufen der Extremfall berechnet, dass die Streuung an den Stufenkanten vor allem im TSS geschieht. Der Anteil des TSS am Gesamtstromtransport beträgt dabei für die hier betrachteten 3D TI Proben bei Bi_2Se_3 etwa 10 % ($\sigma_s = 0.6$ mS [86], $G = \text{ca. } 7$ mS für 16 QL-Film), bei Bi_2Te_3 etwa 50 % ($\sigma_s = 0.7$ mS [87], $G = 1.3$ mS für 14 QL-Film) und bei $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ von Lüpke et al. [114] etwa 70 % ($\sigma_s = 0.3$ mS [114], $G = 0.44$ mS für 9 QL-Film). In [114] wurde der Leitwert σ_{DG} der DG wegen des hohen Anteils des TSS direkt auf diesen Anteil umgerechnet, sodass sich ein Wert von $\sigma_{\text{DG,S}} = (270 \pm 60)$ S/cm ergibt. Die entsprechenden Werte für Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 bezogen auf den TSS sind etwa 300 S/cm und (340 ± 120) S/cm. Beide Werte sind nahe an der DG-Leitfähigkeit in $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$. Dies ist ein Hinweis, dass der TSS eine dominierende Rolle bei der Streuung an den DG in den TI-Filmen spielen könnte, wie es auch die beobachtete Veränderung des TSS an DG in Bi_2Se_3 von Liu et al. [141] suggeriert.

Tabelle 7.2 | Leitfähigkeit σ_{DG} von Domänengrenzen verschiedener 2D-Systeme. Zum Vergleich sind die Leitfähigkeit von Domänengrenzen auf der Oberfläche eines trivialen Systems (Ag-Rekonstruktion auf Si(111)), in TI-ähnlichen Systemen (Graphen und Bi-Film) sowie dreier 3D TI (Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 und $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$) angegeben. Alle Werte wurden mittels STP gemessen. Die Typenbezeichnung der DG stammt aus den jeweiligen Publikationen und folgt keiner allgemeinen Terminologie. Folgende Kürzel werden benutzt: Domänengrenze (DG), Monolage (ML) und Bilage (BL). Tabelle ähnlich zu [140].

System	Ref.	DG-Typ	Spezifikation	σ_{DG} in S/cm
Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Ag (gestufte Probe wie hier)	[108]	A	Strom parallel zu Si-Stufen	0.15 ± 0.05
			Strom senkrecht zu Si Stufen	35 ± 10
		B	Strom parallel zu Si-Stufen	19 ± 5
			Strom senkrecht zu Si Stufen	> 1000
Graphen auf SiC (0001)	[111]	BL/ML	1 nm-Stufe, Strom BL zu ML	110
			1 nm-Stufe, Strom ML zu BL	130
			80 pm-Stufe, Strom BL zu ML	5300
			80 pm-Stufe, Strom ML zu BL	7100
		ML/ML	250 pm-Stufe	8300
Graphen auf SiO ₂	[111]	9°	DG-Breite: 3.4 nm	240
			DG-Breite: 3.3 nm, mit Falte	180
		12°	DG-Breite: 5.0 nm, mit Falte	90
			DG-Breite: 4.4 nm, mit Falte	80
		14°	DG-Breite: 5.8 nm	130
			DG-Breite: 6.2 nm, mit Falte	100
		21°	DG-Breite: 4.7 nm, mit Falte	100
Bi(111)-Film auf Si(001)	[28]	-	aus Werten in [28] berechnet	2800 ± 700
$(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ auf Si(111)	[114]	-	Streuung an DG nur im TSS	270 ± 60
Bi_2Se_3 -Film auf Si(111) (vgl. Kapitel 5.4.5)	(hier)	-	wenn DG durch gesamten Film	ca. 4500
			wenn Streuung an DG nur im TSS	ca. 300
Bi_2Te_3 -Film auf Si(111) (vgl. Kapitel 6.1.6)	(hier)	-	wenn DG durch gesamten Film	640 ± 200
			wenn Streuung an DG nur im TSS	340 ± 120

Um die vorgestellten Werte für die Leitfähigkeit der Domänengrenzen besser einordnen zu können, wurde in Tabelle 7.2 die Leitfähigkeit von Domänengrenzen anderer Systeme den Werten in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 und $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ gegenübergestellt, ähnlich Tabelle 7.1.

Die Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30°-Ag-Rekonstruktion ist das triviale Vergleichssystem zu den 3D TI. Bei Homoth et al. [108] wurden mittels STP-Messungen verschiedene Typen von DG auf der Oberfläche identifiziert (Typ A und Typ B gemäß Sato et al. [165]). Typ A zeigt sich dabei als eine Erhebung und Typ B als eine Vertiefung in der Topographie. Die Leitfähigkeiten beider DG-Typen unterscheidet sich um etwa ein bis zwei Größenordnungen, wobei Typ B die höheren Leitfähigkeiten zeigt. Zudem sind sie abhängig von der Stromrichtung, durch die sich ihr Wert um etwa zwei Größenordnungen verändert. Die ermittelten Werte der DG für die ($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-Ag-Rekonstruktion in [108] sind gegenüber den bei den 3D TI ermittelten Werten (sowohl für die Gesamtleitfähigkeit als auch bezogen auf den TSS) um bis zu mehreren Größenordnungen kleiner. Dieser Unterschied könnte im elektronischen Aufbau der Probensysteme begründet sein. Während

die Ag-Rekonstruktion ein reines 2D-System ist, sind die 3D TI dotierte Volumenmaterialien mit einem TSS an ihrer Oberfläche. Daher ergeben sich in den 3D TI mehr Transportmöglichkeiten und die DG wirken elektronisch weniger stark als Transportbarrieren. Sollte vorrangig der TSS die Streuung hervorrufen, erscheint die höhere Leitfähigkeit gegenüber der Ag-Rekonstruktion sinnvoll, da die Streuung im TSS gegenüber trivialen Systemen kleiner ist. Man würde daher die recht hohe Leitfähigkeit der DG in dünnen TI-Filmen auch als Folge der geschützten Transporteigenschaften des TSS interpretieren. Im Rahmen der hier durchgeführten Messungen und auch bei Lüpke et al. [114] wurden keine verschiedenen DG-Typen und kein Einfluss der Stromrichtung auf den Wert der Leitfähigkeit der DG beobachtet. Allerdings können beide Aussagen durch die gegebene Messauflösung bedingt sein: Es fehlen zum einen atomar aufgelöste Aufnahmen der Topographie aus den STP-Messungen, die eine Unterscheidung der Domänengrenzen erlauben würden, zum anderen ist die Unsicherheit der bestimmten Leitfähigkeiten aufgrund der Stromdichteabschätzung zu groß, um feine Unterschiede in den Werten sicher unterscheiden zu können.

Das nächste Vergleichssystem in Tabelle 7.2 ist Graphen, das zu den 3D TI sehr ähnlich ist. Bei Clark et al. [111] wurden die Eigenschaften von DG von Graphen auf den Substraten SiC und SiO₂ mittels STP-Messungen untersucht. Graphen kann auf SiC sowohl als Monolage (ML) als auch als Bilage (BL) vorkommen, sodass sich DG auch zwischen ML und BL-Bereichen ausbilden können. In [111] wurden DG zwischen ML/BL-Übergängen mit verschiedenen Stufenhöhen und ML/ML-Übergängen untersucht. Für den Fall einer Stufenhöhe von 1 nm bei ML/BL-Übergängen wurden Leitfähigkeiten der DG um 100 S/cm gefunden, die recht nahe an den hier gefunden Werten (ca. 300 S/cm) sind, falls die Streuung an den DG nur im TSS stattfindet. Für den Fall der einer Stufenhöhe von 80 pm bei ML/BL-Übergängen wurden deutlich höhere Leitfähigkeiten der DG gefunden (5000-7000 S/cm), die vom Wert her eher dem Fall der Streuung an der DG im gesamten TI-Film in Bi₂Se₃ entsprechen (4500 S/cm). Bei beiden Stufenhöhen in Graphen wurde eine Abhängigkeit des Leitwerts von der Stromrichtung über die DG festgestellt. Der Wert ist bei einem Stromfluss von ML zu BL kleiner als von BL zu ML. In [111] wird dies durch die unterschiedliche elektronische Struktur von ML und BL Graphen erklärt. In den hier vorliegenden DG der TI-Filme konnte keine solche Anisotropie im Rahmen der Messunsicherheit festgestellt werden. Dies erscheint auch sinnvoll, da sich beiderseits der DG die elektronische Struktur des TI nicht stark unterscheiden sollte. Der ML/ML-Übergang in Graphen ist dagegen mit 8300 S/cm deutlich höher als die vorgestellten Gesamtleitfähigkeiten der TI (max. 4500 S/cm bei Bi₂Se₃).

In [111] wurde zudem Graphen auf SiO₂ untersucht, wo diverse DG auftreten (siehe auch Tabelle 7.2). [111] unterscheidet die DG nach (1) Fehlorientierungswinkel der DG zueinander, (2) der Breite des DG-Übergangsbereichs (kurz DG-Breite genannt) und (3) ob eine Falte (engl. *wrinkle*) des Graphens an der DG vorhanden ist oder nicht. Dabei ist die elektronische Struktur an den verschiedenen DG auf beiden Domänenseiten sehr ähnlich, so wie es auch in den zuvor vorgestellten 3D TI-Filmen der Fall sein müsste. Die Werte für die Leitfähigkeit

der DG liegen bei einem Fehlwinkel von 9° an der DG bei 240 S/cm und sinken mit zunehmendem Fehlwinkel bis auf 70 S/cm bei einem Fehlwinkel von 21° . Zudem sinkt die DG-Leitfähigkeit mit zunehmender DG-Breite ab und wird durch vorhandene Graphenfallen ebenfalls abgesenkt. Dabei liegen jedoch alle von Clark et al. [111] gefundenen Werte im Rahmen ihrer Größenordnung (um 150 S/cm) im gleichen Bereich wie die für die TI-Filme gefundenen Werte (ca. 300 S/cm), wenn die Streuung nur in der obersten QL oder im TSS stattfindet. Die auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche gefundenen DG können nach ihrem Erscheinungsbild als klare oder ausgefranste DG unterschieden werden. Im Rahmen der Messauflösung konnte jedoch kein Unterschied in der Leitfähigkeit der verschiedenen DG-Strukturen bei Bi_2Se_3 gefunden werden.

Ein ebenfalls recht ähnliches System zu TI-Filmen ist ein dünner (3-5 nm) Bi(111)-Film auf Si(100), der durch Bannani et al. [28] mittels STP untersucht wurde. Der Bi(111)-Film hat in seinem Oberflächenzustand spinpolarisierte Zweige (siehe auch [166] und [167]) wie 3D TI in ihren TSS, wobei der Oberflächenzustand des Bi(111)-Films jedoch insgesamt topologisch trivial ist. Dennoch werden durch die Spinpolarisation des Oberflächenzustands die Streukanäle beschränkt und damit auch die Streuung reduziert [168], ähnlich dem TSS bei den TI-Filmen. Aus STP-Daten in [28] kann eine Gesamtleitfähigkeit der DG von (2800 ± 700) S/cm berechnet werden, die zwischen den entsprechenden Werten für Bi_2Te_3 (640 S/cm) und Bi_2Se_3 (4500 S/cm) liegt, d. h. Bi-Filme und TI-Filme scheinen einander ähnliche DG-Leitfähigkeiten zu haben.

Insgesamt zeigt sich, dass sowohl die Leitfähigkeiten der Stufenkanten als auch die Leitfähigkeit der Domänengrenzen dünner Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Filme in dieser Arbeit konsistent zu dem ähnlichen System $(\text{Bi}_{0.53}\text{Sb}_{0.47})_2\text{Te}_3$ und zu Literaturwerten anderer Systeme ermittelt wurden. Zusammen mit dem in der Tunnelpotentiometrie gemessenen elektrochemischen Potential und den ergänzend gemessenen Mehrpunktmessungen ergibt sich daher folgendes detailliertes Bild des nanoskopischen Elektronentransports in den topologischen Materialien Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 : Bei den untersuchten Filmen war Phononenstreuung in Form eines konstanten Gradienten des Potentials das Hauptmerkmal. Zusätzlich konnten Stufenkanten und Domänengrenzen als Streuer für Leitungselektronen im TSS in Form von Spannungssprüngen im Potential identifiziert werden. Zudem wurde versucht, die Leitfähigkeit der TI-Filme durch Aufdampfen anderer Materialien zu verändern. Während bei Bi_2Se_3 durch zusätzliche Bi-Inseln der Filmleitwert erhöht werden konnte, war bei Fe-Inseln auf Bi_2Te_3 keine signifikante Veränderung ersichtlich.

8 Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnte die Stufenleitfähigkeit von QL-Stufen im topologischen Oberflächenzustand (TSS) sowohl in Bi_2Se_3 als auch in Bi_2Te_3 in Übereinstimmung mit der Messung von Lüpke et al. [114] bestimmt werden. Für Domänengrenzen (DG) konnte in Bi_2Se_3 und in Bi_2Te_3 nur der Gesamtleitwert σ_{DG} bestimmt werden, der sich nach Gleichung (7.1) vermutlich so zusammensetzt: $\sigma_{\text{DG}} = \sigma_{\text{DG,V}} \cdot t + \sigma_{\text{DG,s}}$ mit $\sigma_{\text{DG,V}}$ als der Volumenleitfähigkeit der DG, t als der Schichtdicke des Films und $\sigma_{\text{DG,s}}$ als Leitfähigkeit der DG im TSS. Wenn die hier ermittelten Werte rein auf die Streuung im TSS bezogen wurden, konnte zwar ein zu [114] sehr ähnlicher Bereich von etwa 300 S/cm ermittelt werden, jedoch kann dies allenfalls als Indiz für eine dominante Rolle des TSS gewertet werden. Da sich die elektronische Struktur im TSS und im Volumen recht stark voneinander unterscheidet, kann man keine genaue Aussage über die Verteilung der Leitfähigkeiten fällen. Um dies sicher tun zu können, müsste σ_{DG} in Abhängigkeit von der Schichtdicke t ermittelt werden, wobei die präparierten Filme eine vergleichbare Dotierung aufweisen sollten. Aus der Auftragung von σ_{DG} über die Schichtdicke t könnte so der Anteil $\sigma_{\text{DG,s}}$ der Stufenkante ermittelt werden. Alternativ müsste man wie z. B. bei Hoefer et al. [87] TI-Filme herstellen, die praktisch keine Volumenleitung aufweisen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ebenfalls versucht, die Leitfähigkeit von Stufenkanten und DG stromabhängig zu messen, wie Homoth et al. [108] es für die $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{R}30^\circ\text{-Ag}$ -Rekonstruktion gezeigt haben. Um die Richtung der lokalen Stromdichte bei der STP zu verändern, müssen die beiden Kontaktspitzen versetzt werden. Aus folgenden Gründen ist dies problematisch:

- Die Tunnelspitze wird zu ihrer Sicherheit hierfür zurückgezogen und ggf. ein Stück hochgefahren, sodass man beim erneuten Annähern unter Umständen nicht wieder die gleiche Stelle auf der Probe trifft.
- Die neue Kontaktgeometrie kann manchmal nicht so wie die vorherige Kontaktgeometrie ausgeführt werden, weil z. B. die Tunnelspitze hierfür verschoben oder berührt werden müsste.
- Wenn der exakte Auftreffpunkt der Tunnelspitze nicht ersichtlich wird (so wie beim gestuften Bi_2Se_3 -Film in Kapitel 5.4.4), wird die Stromabschätzung sehr unsicher und bei der Messung werden kleine Unterschiede nicht erkannt.

Es wäre daher wünschenswert, die lokale Stromdichte am Ort der Tunnelspitze ohne Umsetzen der Kontaktspitzen beliebig verändern zu können. Für dieses Problem konnte in Zusammenarbeit mit H. Azazoglu während seiner Bachelorarbeit »Potentiometrie in 3-Punkt-Geometrie« [169] eine von R. Möller entwickelte Erweiterung der STP erprobt werden, die im Folgenden »Vektorfeld-Rastertunnelpotentiometrie (VSTP)« genannt wird.

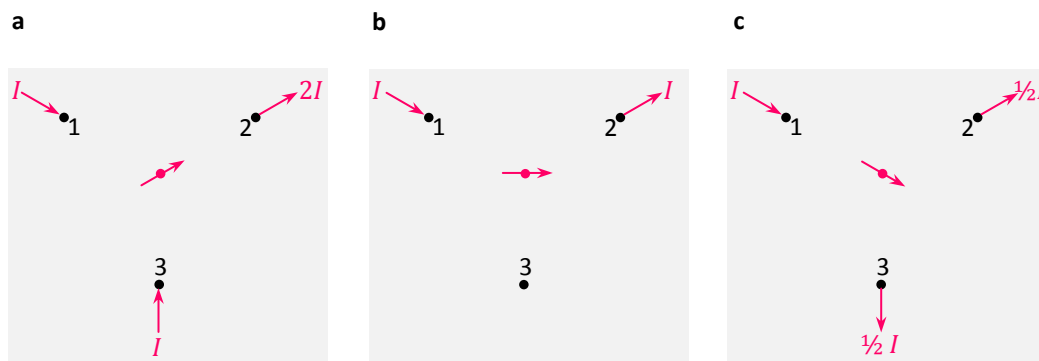


Bild 8.1 | Drehung der Stromrichtung bei einem 3-Punkt-Kontakt. Als Beispiel ist eine Anordnung dreier Kontaktspitzen (Nr. 1-3) als gleichseitiges Dreieck gezeigt. Indem man den Stromfluss über die drei Spitzen variiert, kann man die Stromrichtung in der Mitte der Anordnung (Tunnelspitze) nach Belieben drehen. In (a-c) ist eine Drehung um 60° gezeigt (Strom normiert auf $I_1 = I$).

Während bei der normalen STP zwei Kontaktspitzen für die Aufprägung des Querstroms benutzt werden, sind es bei der VSTP drei. In Bild 8.1 wird das Prinzip verdeutlicht: Die drei Kontaktspitzen (nummeriert mit 1 bis 3) sind in der Form eines gleichseitigen Dreiecks angeordnet. Über die drei Kontaktspitzen zusammen wird gleichviel Strom in die Probe hinein und hinaus gebracht. Entsprechend dieser Stromerhaltung kann man den Stromfluss unter den drei Spitzen aufteilen, wie es auch in Bild 8.1 als Beispiel gezeigt wird. Hierdurch lässt sich die lokale Stromdichte im Zentrum des Dreiecks (Messpunkt der Tunnelspitze) in ihrer lateralen Richtung beliebig einstellen. Erste Versuchsmessung in [169] auf der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Ag-Rekonstruktion haben dies demonstriert. Für Bi_2Se_3 - und Bi_2Te_3 -Filme könnte auf diese Weise eine markante Stufenkante oder DG in Abhängigkeit der Richtung der lokalen Stromdichte vermessen werden, ohne dass die Kontaktgeometrie verändert werden müsste.

Im Zusammenarbeit mit S. Hoepken wurde im Rahmen ihrer Bachelorarbeit »Rastertunnelmikroskopie mit einem FET-Sensor« [170] eine Weiterentwicklung der Rastertunnelmikroskopie mittels eines JFET-Sensors erprobt, die auf einer Idee von R. Möller beruht. Darauf aufbauend wurde durch R. Möller zusammen mit M. Flebbe und P. Graf das JFET-STM entwickelt, mit dem zeitgleich die Topographie und das Potential einer Oberfläche erfasst werden kann [171]. In Bild 8.2 ist ein Schema für eine JFET gestützte Rastertunnelpotentiometrie gezeigt. Ein JFET (engl. *junction field transistor*, »Sperrschichtfeldeffekttransistor«) hat drei Kontakte: *Source* (»Zufluss«), *Drain* (»Abfluss«) und *Gate* (»Schleuse«). Man kann über eine Spannung am Gate den Stromfluss I_{SD} zwischen Source und Drain einstellen. Dabei gibt es einen sogenannten Arbeitsbereich, bei dem sich I_{SD} besonders stark in Abhängigkeit von der eingestellten Gatespannung ändert. Der Leckstrom vom Gate zu Source und Drain beträgt bei Raumtemperatur einige 100 fA. Kühlt man den JFET auf -200°C (Verdampfungstemperatur von flüssigen Stickstoff), ist kein Leckstrom mehr messbar, d. h., das Gate ist praktisch vollständig isoliert [172].

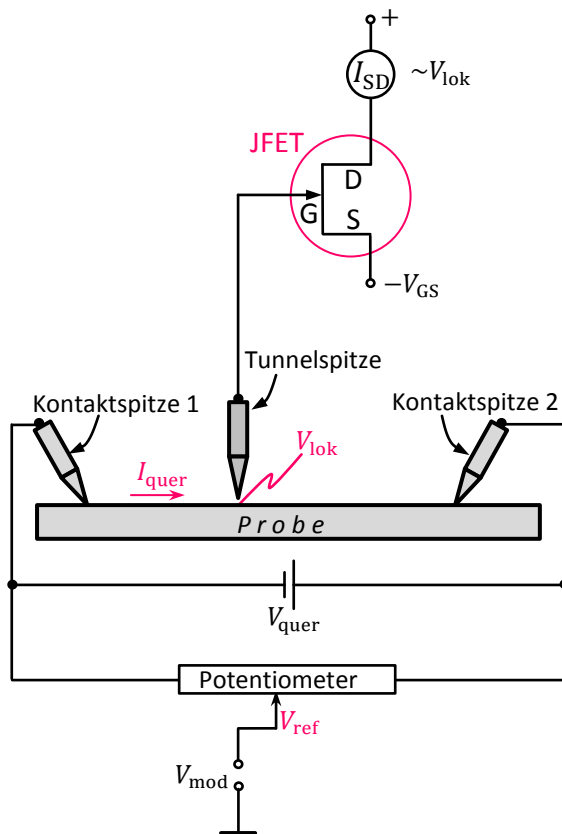


Bild 8.2| STP-Messung mit einem JFET.

Schema eines möglichen Aufbaus einer STP-Messung, bei der die lokale Spannung V_{lok} auf der Probenoberfläche mithilfe eines JFET-Sensors gemessen wird. Die Tunnelspitze wird direkt an das Gate G des JFET angeschlossen, das den Stromfluss zwischen Source S und Drain D beeinflusst. Der Arbeitsbereich des JFET ist dabei durch $-V_{GS}$ definiert. Wird die Spitze über die Oberfläche geführt, passt sich die Spitze und damit das Gate an V_{lok} an, sodass der Stromfluss zwischen Source und Drain verändert wird, d. h. die Veränderung des Stromflusses ist der Veränderung ΔV_{lok} der lokalen Spannung proportional. Diagramm nach R. Möller.

Für die STP-Messung mit dem JFET wird an die Probe eine Querspannung V_{quer} angelegt (vgl. Bild 8.2). Die Tunnelspitze ist mit Gate des JFET verbunden. Wenn das Gate praktisch ideal isolierend ist, nimmt die Tunnelspitze das Potential V_{lok} der unter ihr befindlichen Probenoberfläche an. Rastert die Spitze über die Probe, verändert sich V_{lok} , und damit das Potential der Spitze, sodass über das angeschlossene Gate der Source-Drain-Strom I_{SD} verändert wird. Daher ist die Veränderung des Source-Drain-Stroms proportional zur Veränderung des lokalen Potentials: $\Delta I_{SD} \sim \Delta V_{lok}$. Zur Abstandsregelung wird wie bei der normalen STP ein Modulationssignal V_{mod} benutzt, das im Source-Drain-Strom I_{SD} ein für die Regelung des Abstands Spitze-Probe verarbeitbares Signal hervorruft. Damit der JFET in seinem Arbeitsbereich ist, muss das Gate ungefähr auf dem Potential der Masse sein. Dies erreicht man, indem man über ein Potentiometer (V_{ref}) das lokale Potential V_{lok} der Probe auf das Niveau der Masse einstellt, wobei die relative Spannungsveränderung auf der Probe infolge der Querspannung davon unberührt bleibt. Mit dem JFET wird eine Potentialauflösung von etwa $10 \mu V$ [172] wie bei der normalen STP erreicht, wobei der JFET eine direkte Messung des Potentials ohne einen zweiten Regelkreis gestattet und zudem weniger stör anfällig ist. Damit verbunden ist die Hoffnung, dass man leichter und präziser das Transportfeld von verschiedenen Probenoberflächen messen kann. So könnte man z. B. die zuvor vorgeschlagene schichtendickenabhängige Messung der DG-Leitfähigkeit bei den TI-Filmen leichter und sicherer durchführen.

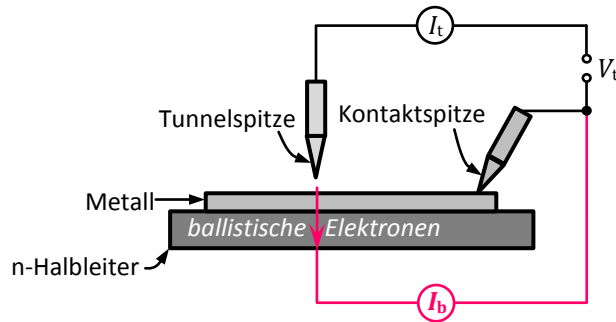


Bild 8.3 | Prinzip der BEEM. Über die Tunnelspitze werden Elektronen in die Probe injiziert. Wenn die Elektronenenergie eV_t nicht zu hoch ist, passieren nur ballistische Elektronen die Schottkybarriere. Bild nach [173].

Eine weitere mögliche Untersuchung der Proben stellt die ballistische Elektronenemissionsmikroskopie (BEEM) dar, die ich im Rahmen meiner gleichnamigen Bachelorarbeit kennengelernt habe [173]. Die Methode wurde 1988 durch N. D. Bell und W. J. Kaiser als Erweiterung der STM entwickelt [174]. Bei BEEM injiziert man über die Tunnelspitze Elektronen in einen dünnen Metallfilm, der sich auf einem n-Halbleiter als Substrat befindet (siehe Bild 8.3). Dabei liegt an der Grenzfläche zwischen Metallfilm und Halbleiter eine für die Materialzusammensetzung charakteristische Energiebarriere φ_{SB} vor, die sogenannte Schottkybarriere. Nur Elektronen mit einer Energie $E > \varphi_{SB}$ können die Schottkybarriere überwinden. Liegt die Elektronenenergie im Bereich $\varphi_{SB} < E < 2\varphi_{SB}$, passieren nur ballistische Elektronen die Schottkybarriere, was auch den Namen BEEM motivierte. Injiziert man also über die Tunnelspitze Elektronen mit einer entsprechenden Spannung $V_t = E/e$ in den Metallfilm (e ist die Elementarladung), wird ein Teil ballistisch das Metall durchqueren und die Schottkybarriere überwinden (sogenannter BEEM-Strom I_b). Der andere Elektronenanteil wird inelastisch gestreut und verbleibt im Metallfilm, wo er über eine Kontaktspitze abgegriffen wird (siehe Bild 8.3). Insgesamt bedeutet dies, dass man mittels BEEM neben der Topographie der Probe auch die Ausbeute an ballistischen Elektronen an der Schottkybarriere lateral mit dem STM messen kann, d. h. man gewinnt Einblicke in die elektronische Struktur der Grenzfläche zwischen Metall und Halbleiter auf der nanoskopischen Skala. Solche Untersuchungen konnten zum Beispiel bereits an dünnen Bi(111)-Filmen auf Si(111) und Si(100) durchgeführt werden [175]. Da die hier gewachsenen Bi₂Se₃- und Bi₂Te₃-Filme einen metallischen Leitungscharakter haben, könnten sie z. B. zusammen mit einer Si(111)-Oberfläche eine Schottkybarriere ausbilden. In der Literatur konnte zumindest für Bi₂Se₃ auf einer wasserstoffterminierten Si(111)-Oberfläche eine Schottkybarriere von 0.31 eV gemessen werden [176]. Für Bi₂Te₃ fehlen entsprechende Literaturangaben, jedoch erscheint es aufgrund der Ähnlichkeit zu Bi₂Se₃ wahrscheinlich, dass auch Bi₂Te₃ eine Schottkybarriere auf Si ausbildet. BEEM-Messungen wurden – meiner Kenntnis nach – bisher nicht an Bi₂Se₃/Si oder Bi₂Te₃/Si versucht. Dabei könnte BEEM einen tiefen Einblick in die Grenzfläche bzw. den Übergang zwischen einem topologischen Material wie Bi₂Se₃ oder Bi₂Te₃ und einem trivialen Material wie Silicium geben.

9 Anhang

9.1 Doppelverdampfer

Dieser Abschnitt des Anhangs bezieht sich auf Kapitel 3.4.4. Dort wurde eine Einführung in Aufbau und Funktion des Doppelverdampfers gegeben. In den nachfolgenden zwei Kapiteln finden sich Ergänzungen hierzu.

9.1.1 Mechanischer Aufbau

Zur besseren Übersicht und Verständnis des mechanischen Aufbaus ist in Bild 9.1 eine Explosionszeichnung des Doppelverdampfers gezeigt (vgl. Bild 3.19). Außerdem ist die zu Bild 9.1 zugehörige Teileliste in Tabelle 9.1 aufgeführt. Auf die Tiegel der zwei Verdampferzellen im Doppelverdampfer kann jeweils maximal eine Spannung von 1 kV gegenüber dem Filament angelegt werden, wobei der maximale Emissionsstrom zwischen Tiegel und Filament auf 30 mA begrenzt ist, sodass sich maximal eine elektrische Heizleistung von 30 W je Tiegel ergibt. Die jeweiligen Filamente erreichen maximal eine Leistung von jeweils 15 W. Hierdurch ergibt sich eine maximal in jede einzelne Verdampferzelle einbringbare Leistung von 45 W, sodass im gesamten Verdampferkopf durch die zwei Verdampferzellen eine elektrische bzw. thermische Leistung von maximal 90 W erreicht wird. Mit einer Kühlleistung von 0.75 l/min Brauchwasser (20 °C im Kühlwasservorlauf) wird der Verdampferkopf bei den Kollektoren (weitest entfernter Ort zum Kühlpunkt am Verdampferkopf) etwa 275 °C warm, wenn die maximale elektrische Leistung in den Verdampfer eingebracht wird (90 W). Die Bestimmung der maximalen Betriebsparameter sowie der maximalen Betriebstemperatur wurde zusammen mit D. Tarasevich und K. Bartsch durchgeführt. Ergänzend zu Bild 3.20 sind in Bild 9.2 die für die Verdampfung von Bismut mittels der Quarzwaage gemessene Aufdampfrate μ (0.1-2.3 nm/min) bzw. der im Doppelverdampfer gemessene Kollektorstrom I_K (1-71 nA) über den eingestellten Emissionsstrom I_E (2.5-5.3 mA) logarithmisch aufgetragen.

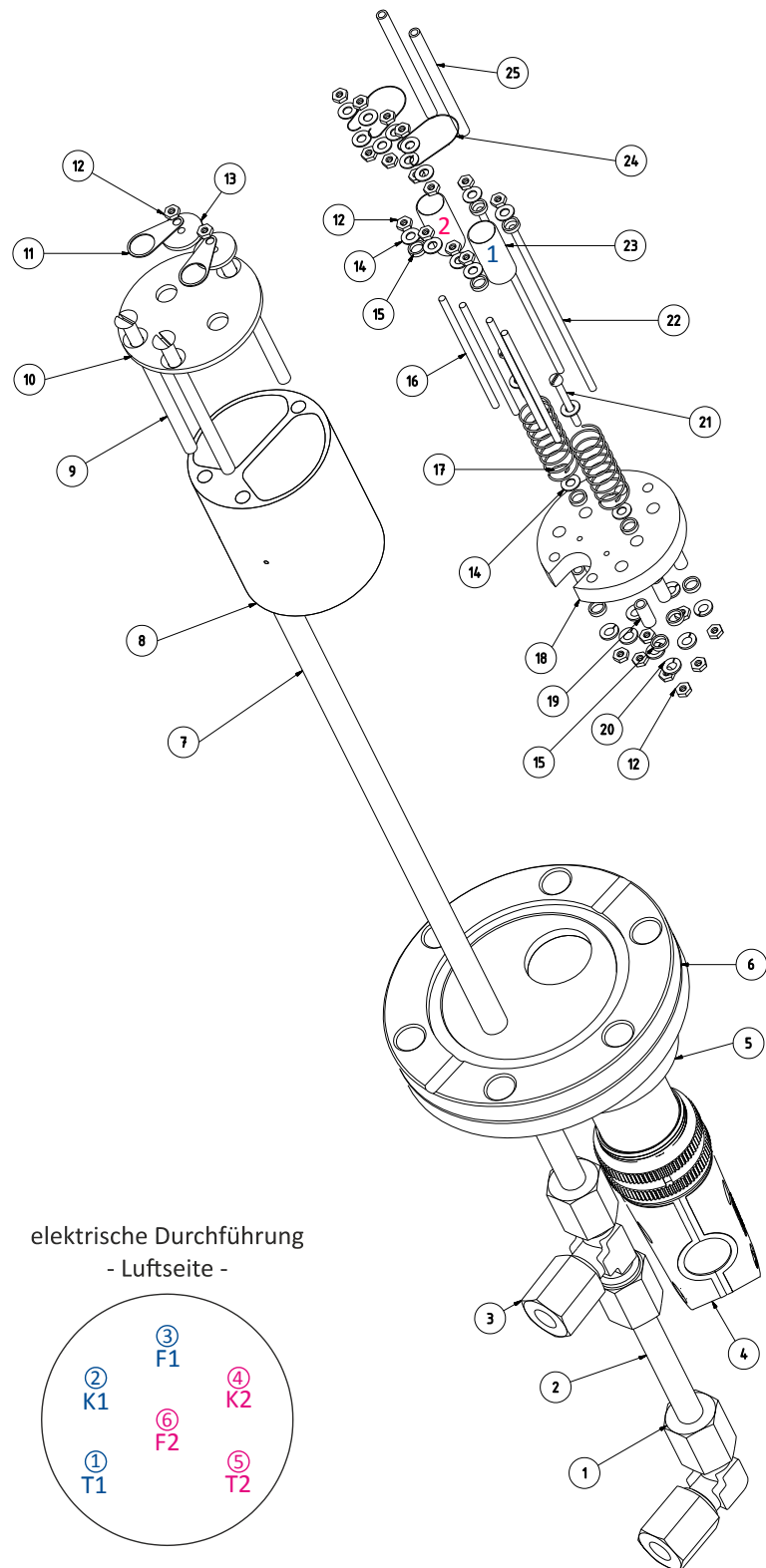


Bild 9.1| Aufbau des Doppelverdampfers. Gezeigt sind eine Explosionszeichnung des Verdampfers mit Positionsnummern der Einzelteile (siehe auch Tabelle 9.1) sowie die Belegung der einzelnen Pins der elektrischen Durchführung (von der Luftseite her gesehen). Dabei sind die Leitungen mit F für Filament, T für Tiegel und K für Kollektor sowie nach der Nummer des jeweiligen Tiegels benannt. Vorbild für den Doppelverdampfer ist eine Konstruktion für Elektronenstoßverdampfer aus der Arbeitsgruppe Horn-von Hoegen [59]. Technische Zeichnung hier von T. Roos.

Tabelle 9.1 | Teileliste der Positionen des Doppelverdampfers in Bild 9.1.

Pos.	Anzahl	Spezifikation
1	1	Fitting 90°, Typ Swagelok
2	1	innere Kühlleitung (Kanüle), Ø 3 mm, aus Edelstahl
3	1	Fitting T-Stück, Typ Swagelok
4	1	Jaeger MIL Rundsteckverbinder (MIL-DTL-5015), Buchsenkontakte, 6-polig
5	1	Stromdurchführung 6-polig (max. 5 A und 1 kV je Pol), passend zu Position 4
6	1	Flansch DN 40 aus Aluminium
7	1	äußere Kühlleitung, Ø 6 mm aus Edelstahl
8	1	Kühlkörper der Verdampferzellen aus OF HC Kupfer
9	3	Senkschrauben M3 × 47 aus Edelstahl
10	1	Deckel der Verdampferzellen aus Edelstahl
11	2	Kollektor, Edelstahl
12	24	M1.6 DIN EN 24 036 aus Edelstahl
13	2	Kollektorisolierung aus Macor
14	18	Unterlegscheibe DIN 433-2.2 aus Edelstahl
15	12	Keramikscheibe mit Ø 4 mm (außen), 3.1 mm (innen) und Länge 1 mm
16	4	Gewindestangen 1.6 mm aus Edelstahl für Filamente
17	2	Haltespirale aus Wolframdraht mit Ø 0.5 mm
18	1	Bodenplatte Verdampferzelle aus Aluminium
19	6	Keramikrohr mit Ø 3 mm (außen), 2 mm (innen) und Länge 6.9 mm
20	8	Federscheibe DIN 128-A2 aus Edelstahl
21	2	Schraube M1.6 × 16 aus Edelstahl
22	2	Gewindestangen 1.6 mm aus Edelstahl für Kollektoren (länger als Position 16)
23	2	Tiegel aus Tantal
24	2	Filament aus Wolframdraht mit Ø 0.15 mm (Mateck, Bestell-Nr. 15111720)
25	2	Keramikhülse mit Ø 2.7 mm (außen), 1.7 mm (innen) und Länge 37 mm

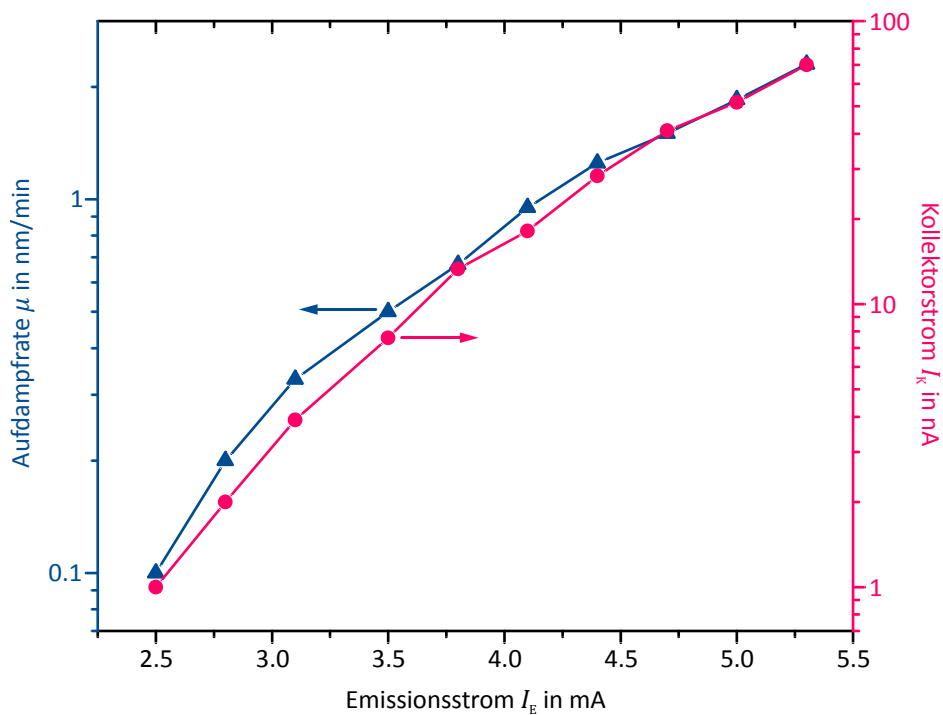
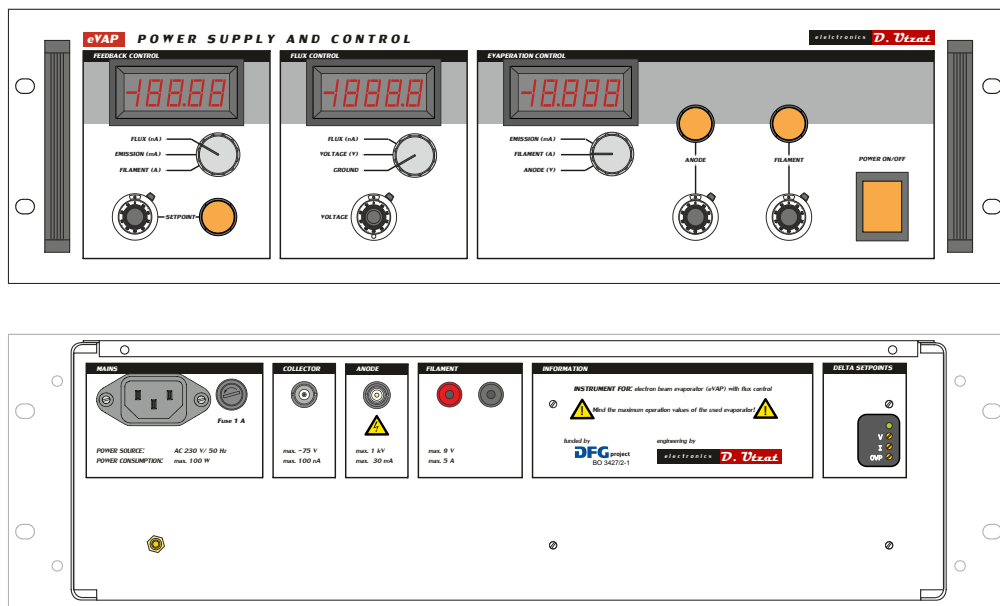


Bild 9.2 | Abhängigkeit der Aufdampfrate μ bzw. des Kollektorstroms I_K vom Emissionsstrom I_E .
 μ und I_K sind logarithmisch über die Emissionsstromstärke I_E aufgetragen. Bei der Messung der Daten wurde Bismut verdampft, wobei eine konstante Tiegelspannung von 1 kV eingestellt war.

9.1.2 Steuer- und Regelelektronik

Zur Steuerung und Regelung des Verdampfungsprozesses wurde eine entsprechende Elektronik in Zusammenarbeit mit D. Utzat hergestellt (siehe Bild 9.3a). Dabei kann die Steuer- und Regelelektronik den Verdampfungsprozess in jeweils einem Tiegel des Doppelverdampfers ausführen.

a



b

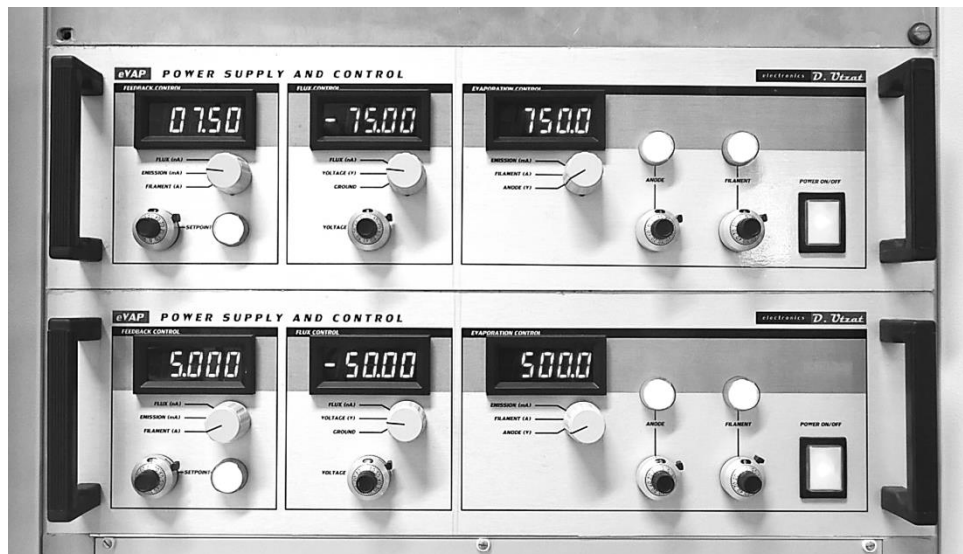


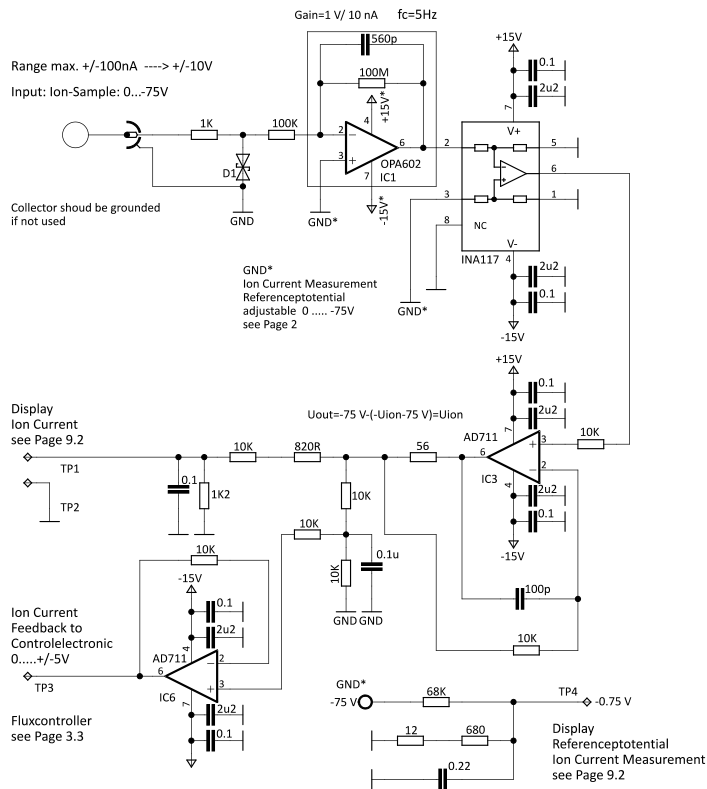
Bild 9.3 | Steuer- und Regelelektronik für den Doppelverdampfer. (a) Zeichnung der Vorder- und Rückseite eines Steuer- und Regelmoduls für einen Tiegel des Doppelverdampfers. (b) Photographie beider Module für den Doppelverdampfer, die bereits in dem Rack der Präparationskammer eingebaut sind.

Zur Versorgung des Filaments kann das Modul bis zu einer Spannung von 9 V einen Strom von maximal 5 A bereitstellen, wobei das Modul spannungsbegrenzt arbeitet. Über die sogenannten Delta Setpoints auf der Rückseite des Geräts lässt sich die Maximalspannung einstellen und auch gegebenenfalls erhöhen. Die maximale Stromstärke ist aufgrund der elektrischen Durchführung in das UHV-System auf 5 A begrenzt. Als Anodenpotential lässt sich auf den Tiegel eine Spannung von bis zu +1 kV gegenüber dem Filament legen. Dabei ist der Emissionsstrom durch das Modul auf 30 mA begrenzt, darüber hinaus lässt das Modul die Spannungsversorgung der Andode zusammenbrechen. Auf den Kollektor kann durch das Modul maximal eine Spannung von -75 V gegenüber dem Filament gelegt werden, wobei der maximal messbare Kollektorstrom 100 nA beträgt. Für eine einfachere Bedienung kann das Modul den Filamentstrom, den Emissionsstrom oder den Kollektorstrom auf einen durch den Benutzer festgelegten Sollwert regeln. Hierfür verändert das Modul den Filamentstrom so lange, bis der Sollwert der entsprechenden Regelgröße erreicht wird, und versucht diesen Sollwert dann stabil zu halten. Um beide Verdampferzellen des Doppelverdampfers bedienen zu können, wurden zwei Steuer- und Regelmodule gebaut (siehe auch Bild 9.3b). Auf den nachfolgenden Seiten ist der Schaltplan für das Steuer- und Regelmodul gezeigt. Folgende Tabelle gibt eine Übersicht über die einzelnen gezeigten Schaltkreise des Schaltplans:

Tabelle 9.2 | Liste der einzelnen Planseiten des Schaltplans für das Steuer- und Regelmodul.

Seite/ Page	Bezeichnung/ Name
1	Kollektorstrommessung/ <i>Ion Current Measurement</i>
2	Kollektorspannung/ <i>Collector Voltage</i>
3.1	Auswahl Regelgrößen/ <i>Selection Control Mode</i>
3.2	PI-Regler/ <i>PI Controller</i>
3.3	Flusskontrolle/ <i>Flux Controller</i>
4	Schnittstelle Stromversorgung Filament/ <i>Interface Filament Powersupply</i>
5	Schnittstelle Schaltkreis Hochspannungsmodul/ <i>Interface Circuit HV-Modul</i>
6	Ansteuerlogik Kontrollelemente/ <i>Control Logic</i>
7	Stromversorgung Hochspannungsmodul, Ansteuerlogik Displays/ <i>Powersupply High Voltagemodul, Control-logic Displays</i>
8	Gesamtstromversorgung/ <i>Powersupply</i>
9.1	Anzeigeschaltung Sollwerte/ <i>Display Setpoints</i>
9.2	Anzeigeschaltung Kollektor/ <i>Display Collector</i>
9.2	Anzeigeschaltung Anode, Filament/ <i>Display High Voltage, Filament</i>

Ion Current measurement Page 1

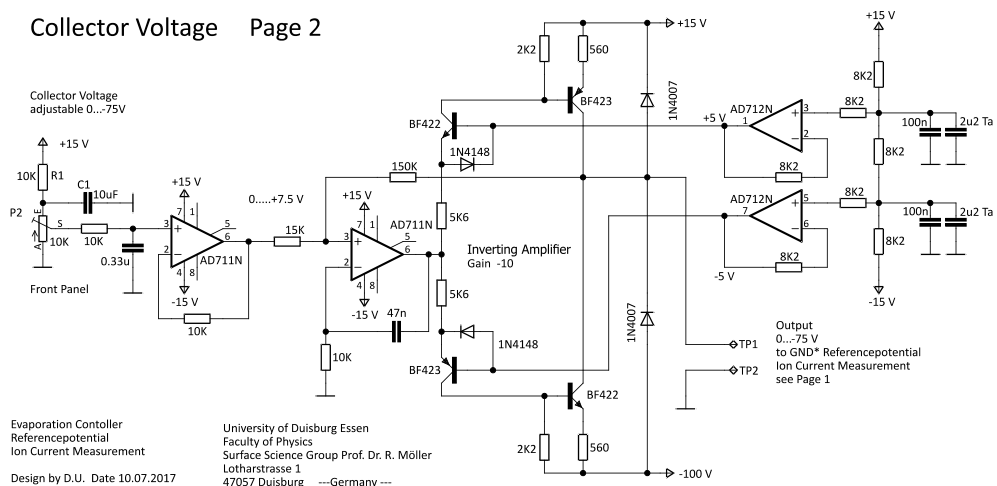


Evaporation Controller
Ion Current Measurement

Design by D.U. Date 10.07.2017

University of Duisburg Essen
Faculty of Physics
Surface Science Group Prof. Dr. R. Möller
Lotharstrasse 1
47057 Duisburg ---Germany---

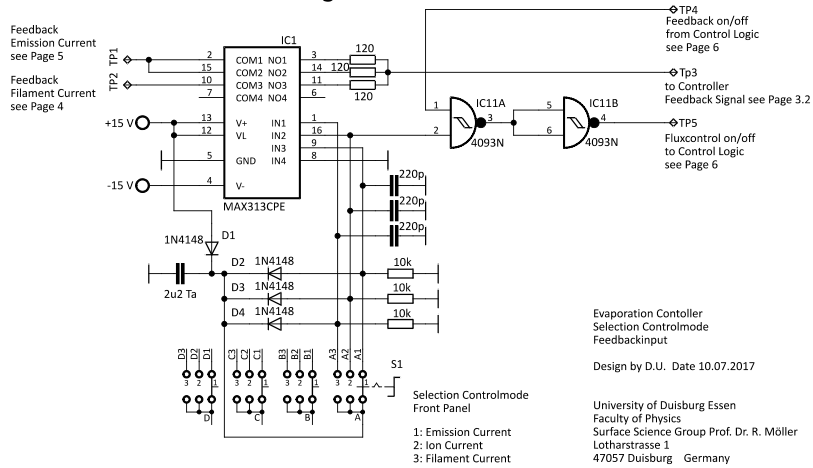
Collector Voltage Page 2



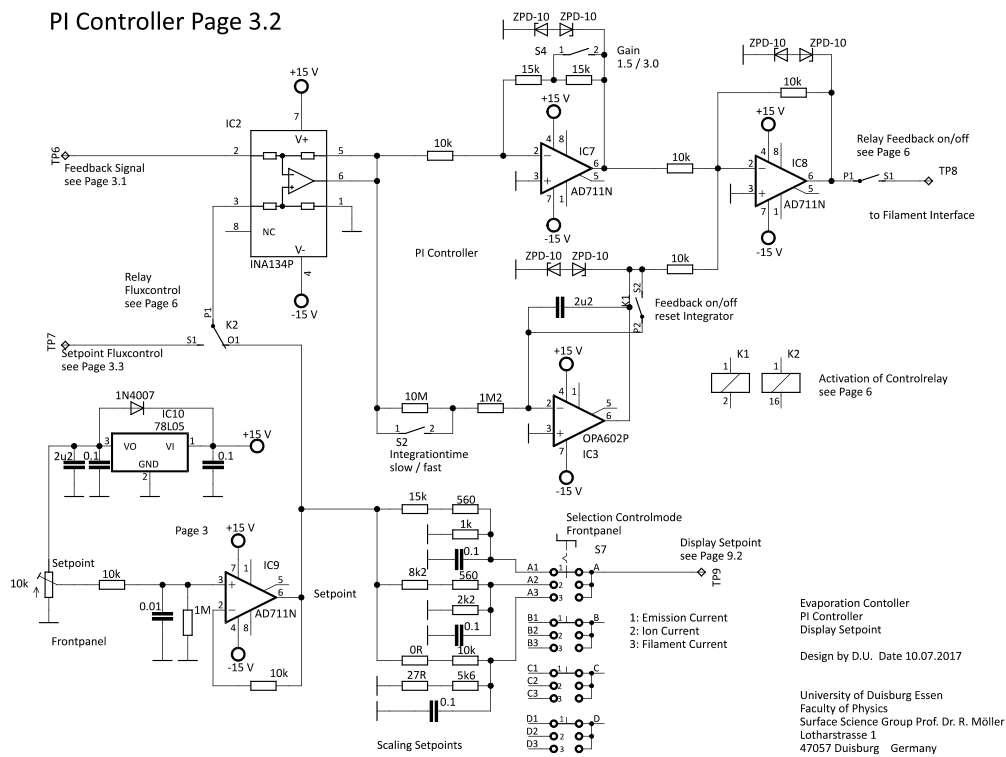
Evaporation Controller
Referencepotential
Ion Current Measurement
Design by D.U. Date 10.07.2017

University of Duisburg Essen
Faculty of Physics
Surface Science Group Prof. Dr. R. Möller
Lotharstrasse 1
47057 Duisburg ---Germany---

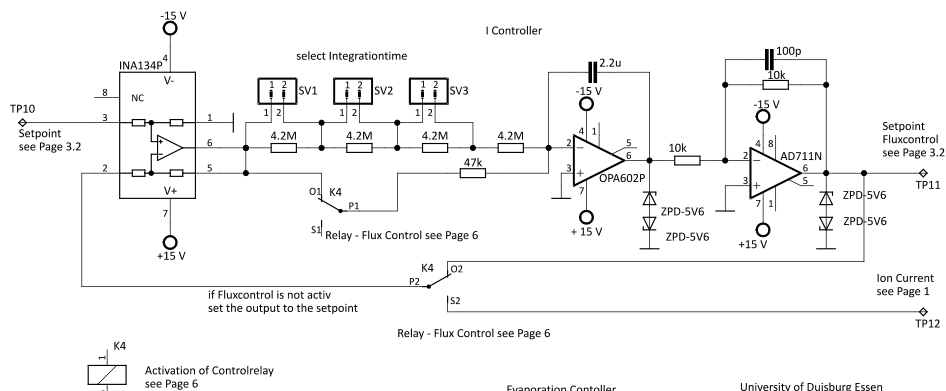
Selection Control Mode Page 3.1



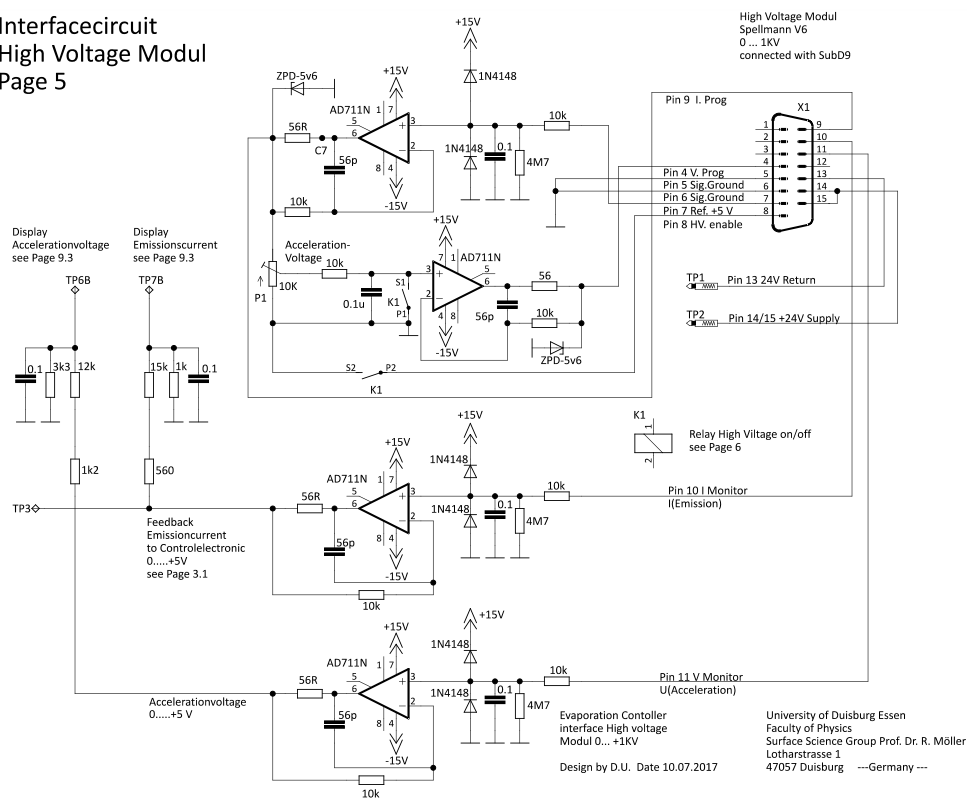
PI Controller Page 3.2



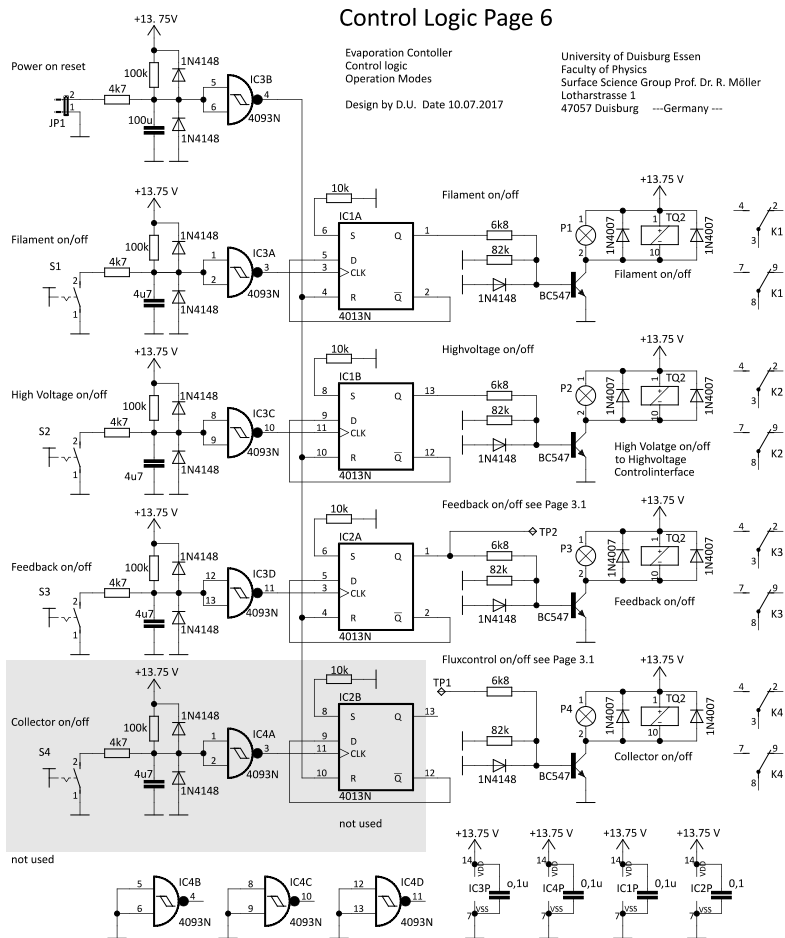
Flux Controller Page 3.3



Interfacecircuit
High Voltage Modul
Page 5



Control Logic Page 6



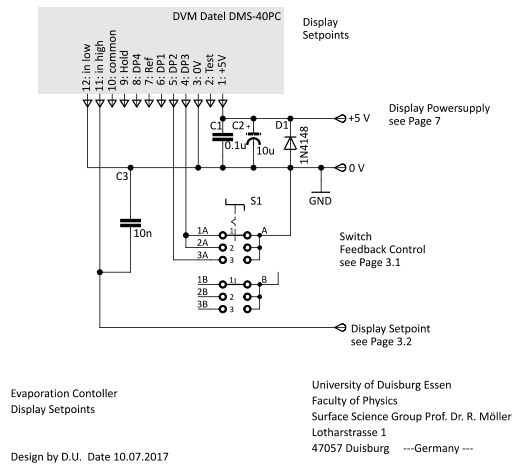
[illegible]

Evaporation Controller
Power Supply Ion Current Measurement
and Reference potential, Systemelectronics

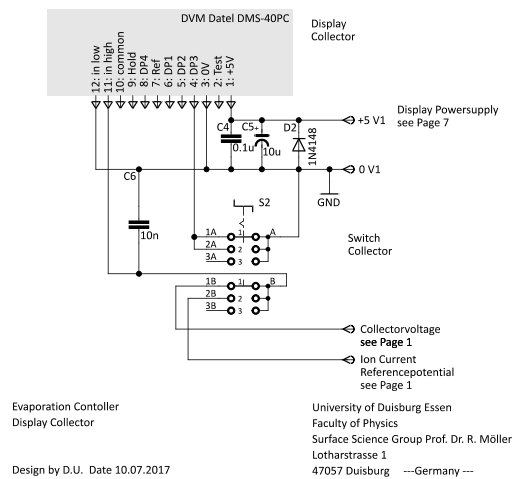
University of Duisburg Essen
Faculty of Physics
Surface Science Group Prof. Dr. R. Möller
Lotharstrasse 1
47057 Duisburg ---Germany---

Design by D.U. Date 10.07.2017

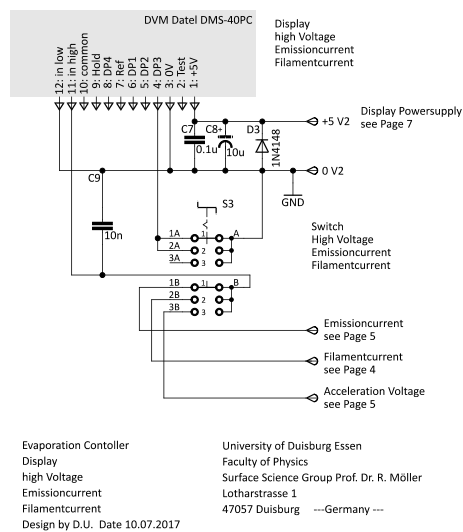
Display Setpoints Page 9.1



Display Collector Page 9.2



Display High Voltage, Filament Page 9.3



9.2 Kennlinien der MPM

Die in den Diagrammen im Haupttext gezeigten Widerstände R bzw. V/I der Proben wurden aus 2PP- bzw. 4PP-Messungen ermittelt, indem die Steigung der linearen I - V -Kennlinien bestimmt wurde. Daher werden im Folgenden als Ergänzung maximal fünf zugehörige I - V -Kennlinien für jedes Diagramm gezeigt. Sie sind so ausgewählt, dass sie möglichst den gesamten Bereich der jeweiligen Diagrammabzisse abdecken und der aus ihrer Steigung bestimmte Wert von R bzw. V/I möglichst nahe der im Diagramm angepassten Fitfunktion ist.

9.2.1 Bi_2Se_3 -Proben

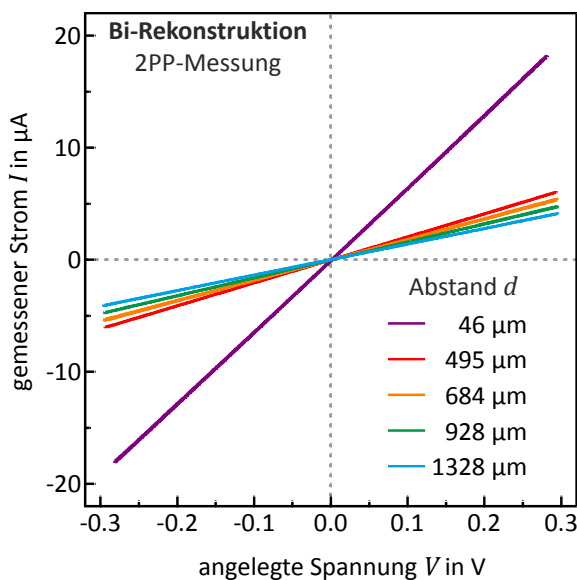


Bild 9.4| Kennlinien der abstandsabhängigen 2PP-Messung für die Bi-Rekonstruktion in Bild 5.2. Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

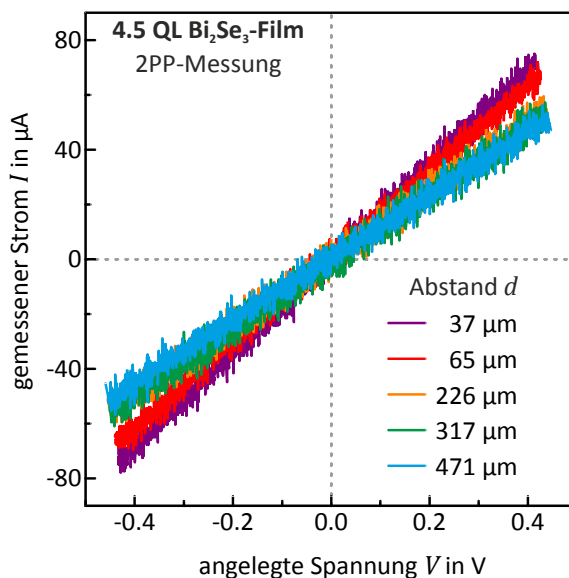


Bild 9.5| Kennlinien der abstandsabhängigen 2PP-Messung für den 4.5 QL Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.6. Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

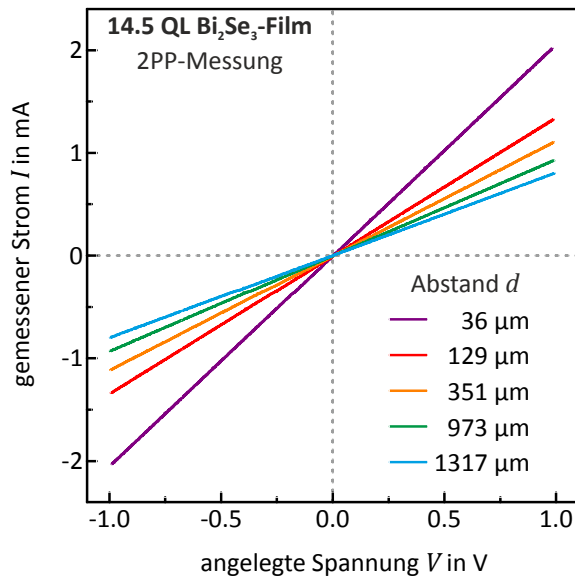


Bild 9.6| Kennlinien der abstandsabhängigen 2PP-Messung für den 14.5 QL Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.12. Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

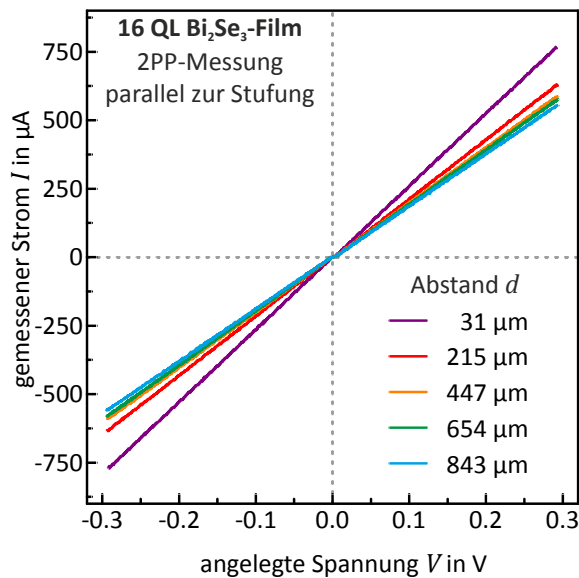


Bild 9.7| Kennlinien der abstandsabhängigen 2PP-Messung für den 16 QL Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.20a (paralleler Fall). Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

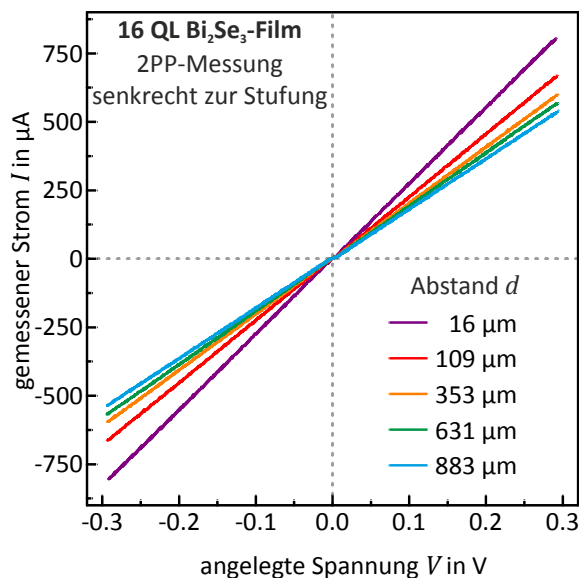


Bild 9.8| Kennlinien der abstandsabhängigen 2PP-Messung für den 16 QL Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.20b (senkrechter Fall). Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

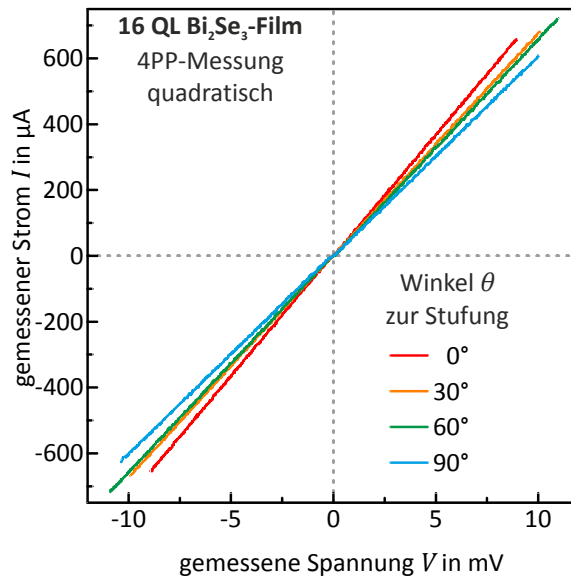


Bild 9.9| Kennlinien der winkelabhängigen, quadratischen 4PP-Messung für den 16 QL Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.22. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene Winke θ der 4PP-Geometrie gegenüber der Stufung des Bi_2Se_3 -Films.

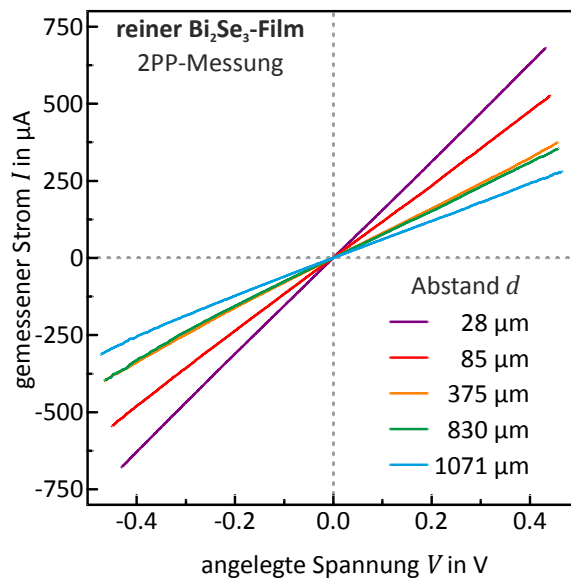


Bild 9.10| Kennlinien der 2PP-Messung für den Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.27. Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

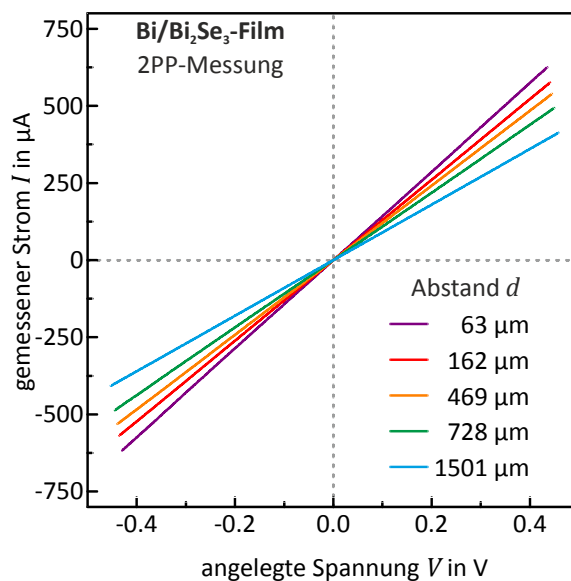


Bild 9.11| Kennlinien der 2PP-Messung für den Bi/ Bi_2Se_3 -Film in Bild 5.27. Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

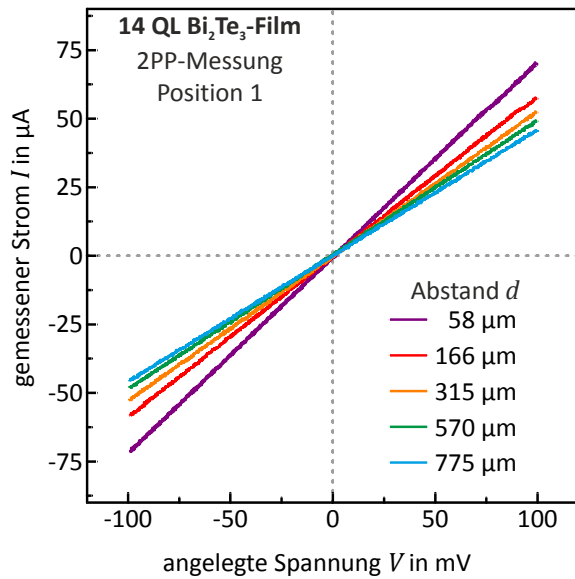
9.2.2 Bi_2Te_3 -Proben

Bild 9.12 | Kennlinien der 2PP-Messung für den Bi_2Te_3 -Film (Pos. 1) in Bild 6.2.

Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

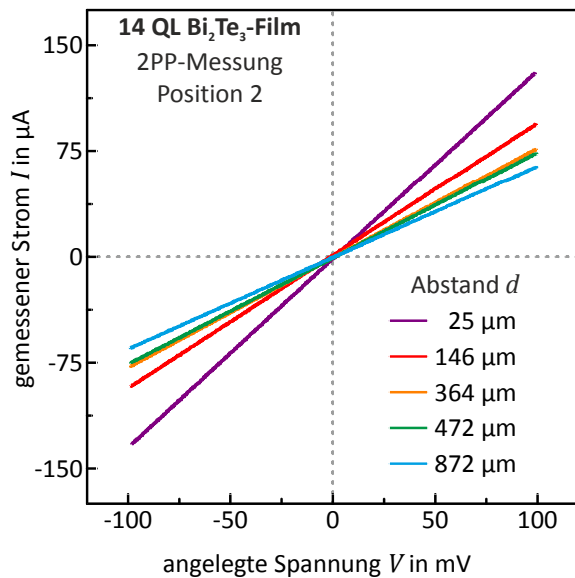


Bild 9.13 | Kennlinien der 2PP-Messung für den Bi_2Te_3 -Film (Pos. 2) in Bild 6.2.

Auftragung des gemessenen Stroms I über die angelegte Spannung V für verschiedene Abstände d der Kontaktspitzen.

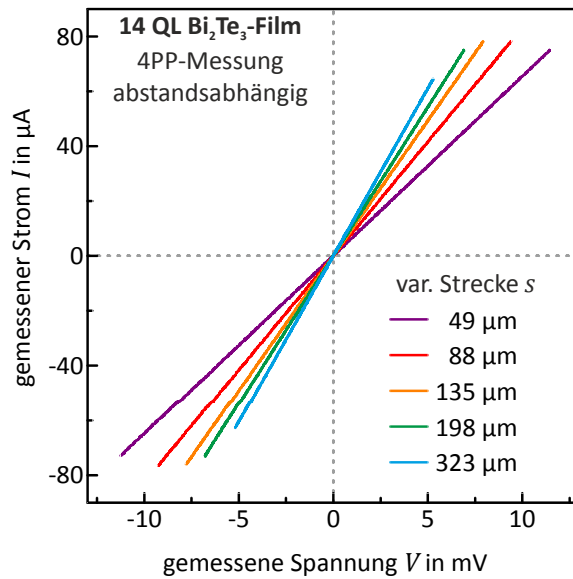


Bild 9.14| Kennlinien der abstandsabhängigen 4PP-Messung für den 14 QL Bi_2Te_3 -Film in Bild 6.3. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene variierte Strecken s in der 4PP-Geometrie.

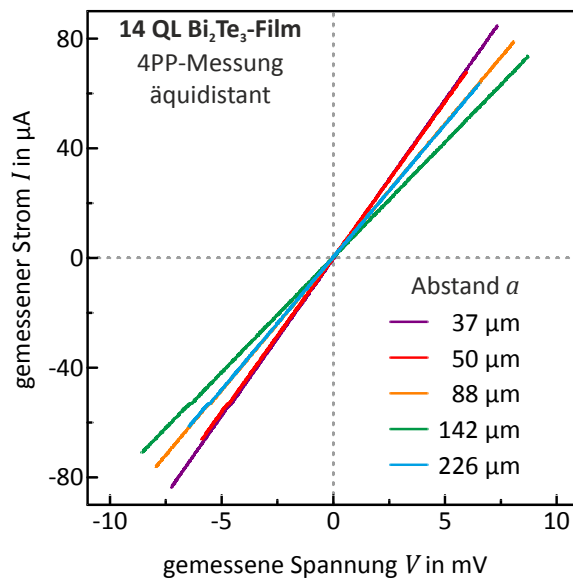


Bild 9.15| Kennlinien der äquidistanten 4PP-Messung für den 14 QL Bi_2Te_3 -Film in Bild 6.4. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene Abstände a der 4PP-Geometrie.

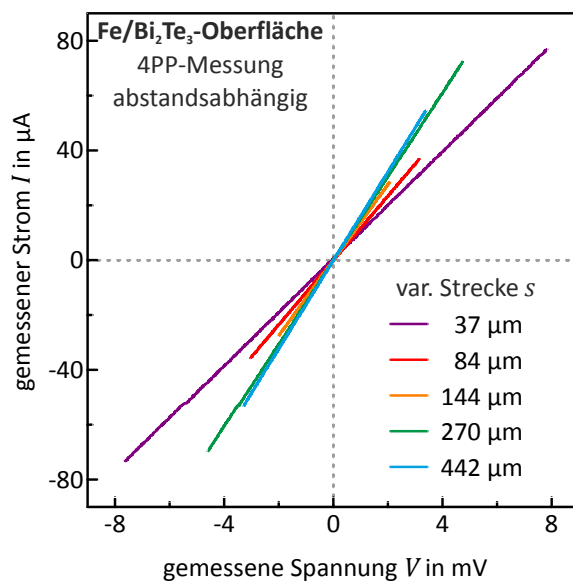


Bild 9.16| Kennlinien der abstandsabhängigen 4PP-Messung für die Fe/ Bi_2Te_3 -Oberfläche in Bild 6.10. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene variierte Strecken s in der 4PP-Geometrie.

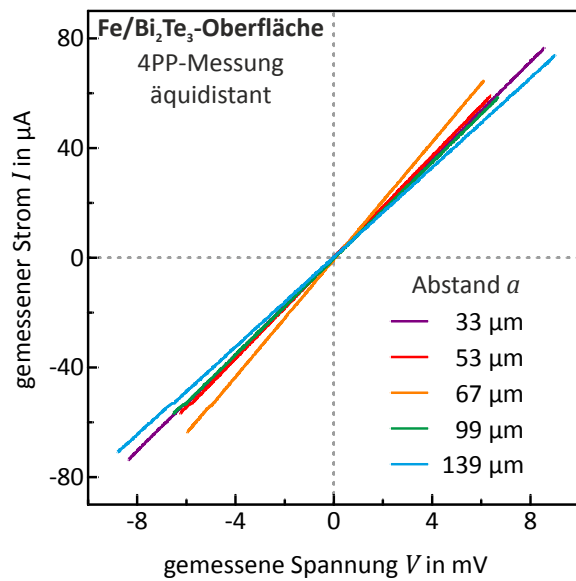


Bild 9.17 | Kennlinien der äquidistanten 4PP-Messung für die Fe/Bi₂Te₃-Oberfläche in Bild 6.11. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene Abstände a der 4PP-Geometrie.

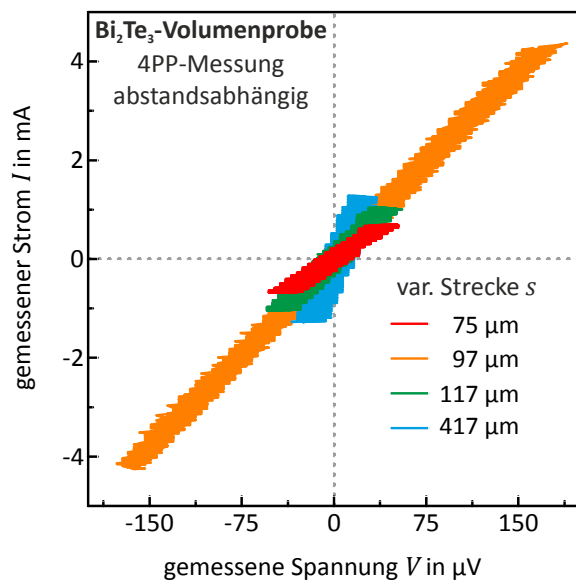


Bild 9.18 | Kennlinien der abstandsabhängigen 4PP-Messung für die Bi₂Te₃-Volumenprobe in Bild 6.15. Auftragung des gemessenen Stroms I über die gemessene Spannung V für verschiedene variierte Strecken s in der 4PP-Geometrie.

9.3 STP-Studien an Stufenkanten

9.3.1 QL-Stufe auf der Bi_2Se_3 -Oberfläche

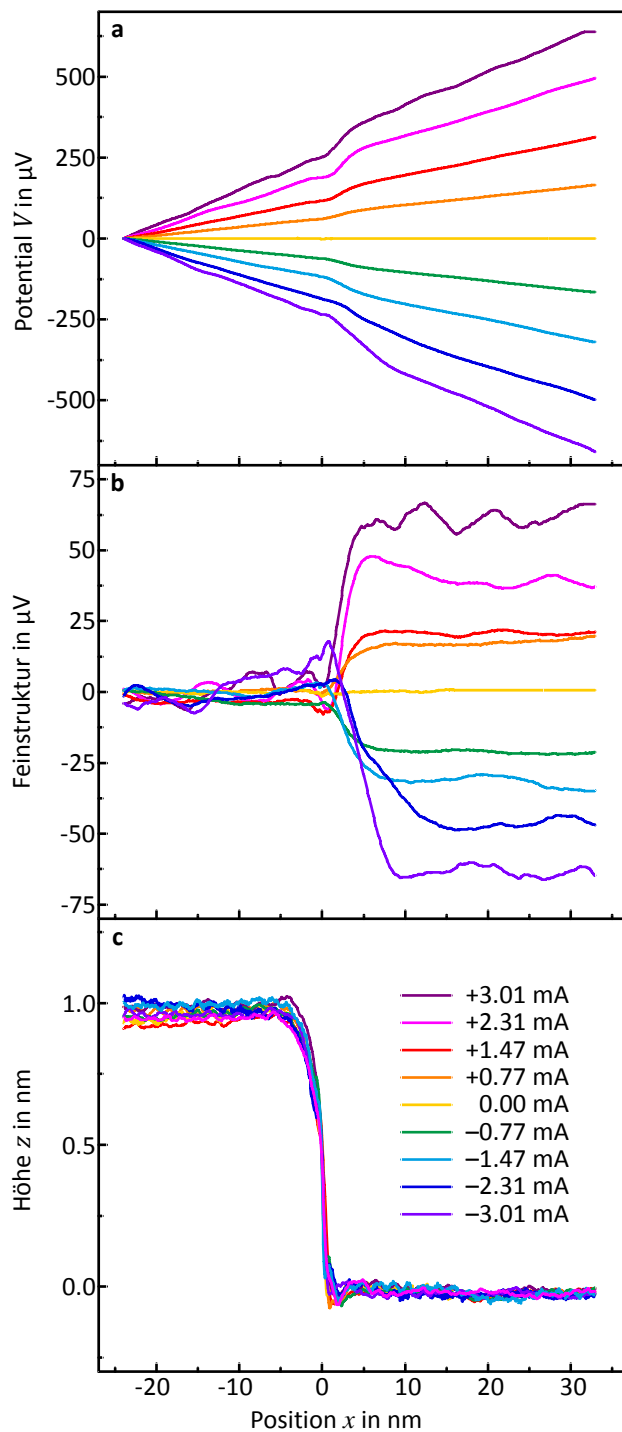


Bild 9.19 | Ergänzende Daten der STP-Studie an der 1 QL-Stufe in Bi_2Se_3 für die positive Scanrichtung. Gezeigt sind die gemittelten Profile für: (a) Potential, (b) Feinstruktur (a mit abgezogenem Terrassengradient) und (c) die zugehörige Topographie (die Stufenkante ist auf $x = 0$ gesetzt).

Kommentar: STP-Studie einer 1 QL-Stufe auf einem etwa 14.5 QL dicken Bi_2Se_3 -Film bei Raumtemperatur mit $V_{\text{mod}} = 2 \text{ mVpp}$ bei 2.1 kHz , $I_t = 12 \text{ pA}$. Für I_{quer} siehe die Legenden in Bild 9.19 und Bild 9.20. Die hier gezeigten Messdaten gehören zu Bild 5.17 und Bild 5.18. Die Auffächerung der Potentialschnitte ist in Bild 9.19 und Bild 9.20 symmetrisch und zueinander gleich. Die Aufspaltung in der Feinstruktur ist bei beiden Scanrichtungen sehr ähnlich.

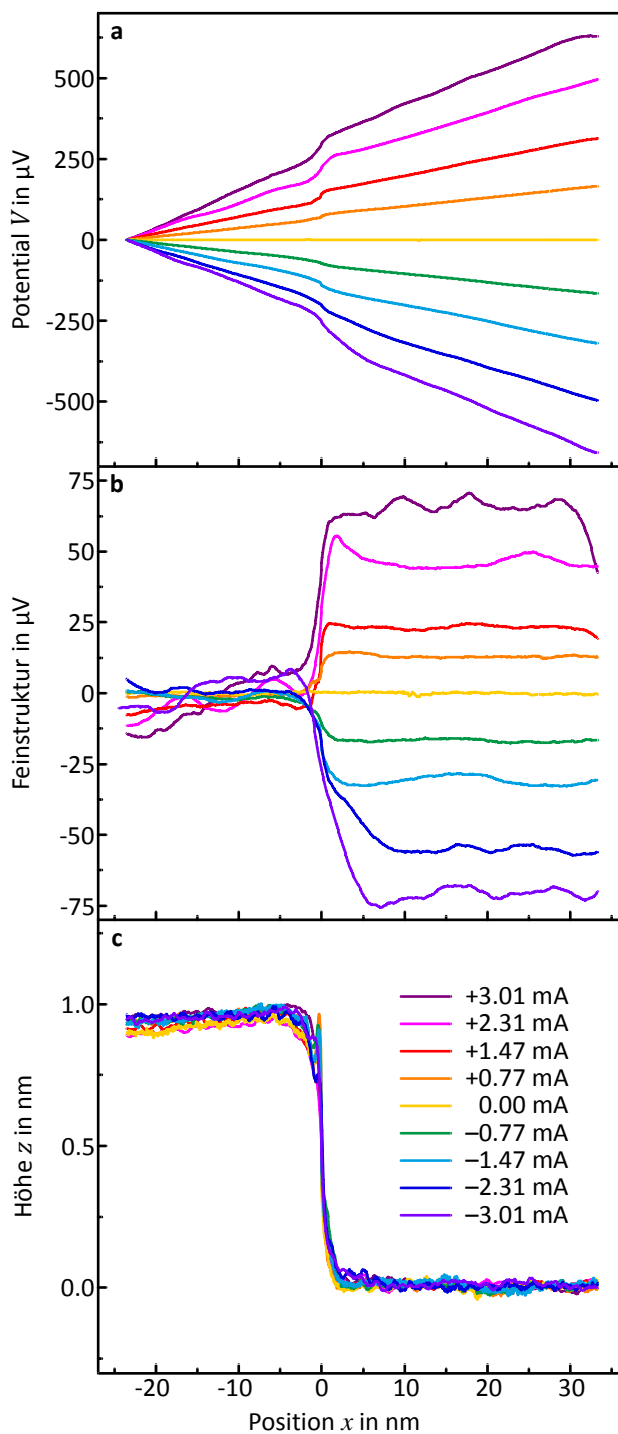


Bild 9.20 | Ergänzende Daten der STP-Studie an der 1 QL-Stufe in Bi_2Se_3 für die negative Scanrichtung. Gezeigt sind die gemittelten Profile für: (a) Potential, (b) Feinstruktur (a mit abgezogenem Terrassengradient) und (c) die zugehörige Topographie (die Stufenkante ist auf $x = 0$ gesetzt).

9.3.2 QL-Stufe auf der Bi_2Te_3 -Oberfläche

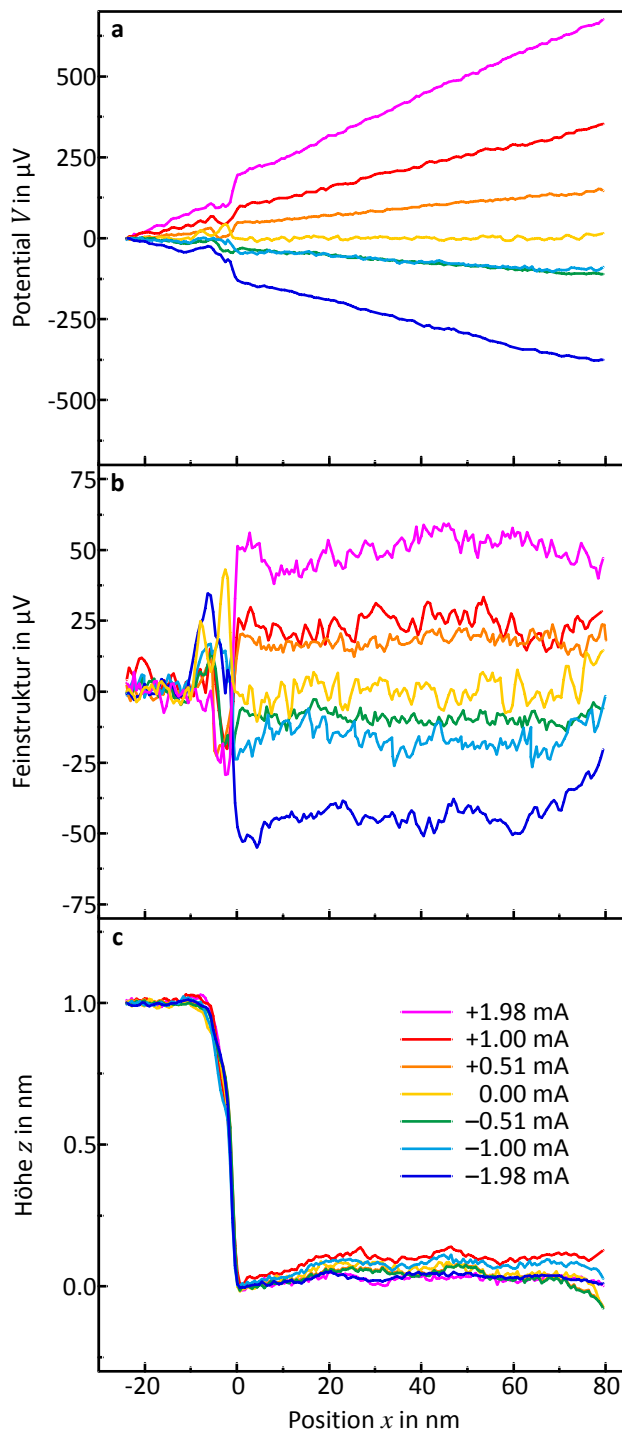


Bild 9.21 | Ergänzende Daten der STP-Studie an der 1 QL-Stufe in Bi_2Te_3 für die positive Scanrichtung. Gezeigt sind die gemittelten Profile für: (a) Potential, (b) Feinstruktur (a mit abgezogenem Terrassengradient) und (c) die zugehörige Topographie (die Stufenkante ist auf $x = 0$ gesetzt).

Kommentar: STP-Studie einer 1 QL-Stufe auf einen etwa 14 QL dicken Bi_2Te_3 -Film bei Raumtemperatur mit $V_{\text{mod}} = 3 \text{ mVpp}$ bei 2.269 kHz , $I_t = 10 \text{ pA}$. Für I_{quer} siehe die Legenden in Bild 9.21 und Bild 9.22. Die hier gezeigten Messdaten gehören zu Bild 6.7 und Bild 6.8. Die Auffächerung der Potentialschnitte ist in Bild 9.21 und Bild 9.22 asymmetrisch und einander entgegengesetzt. Die Aufspaltung in der Feinstruktur ist bei beiden Scanrichtungen sehr ähnlich.

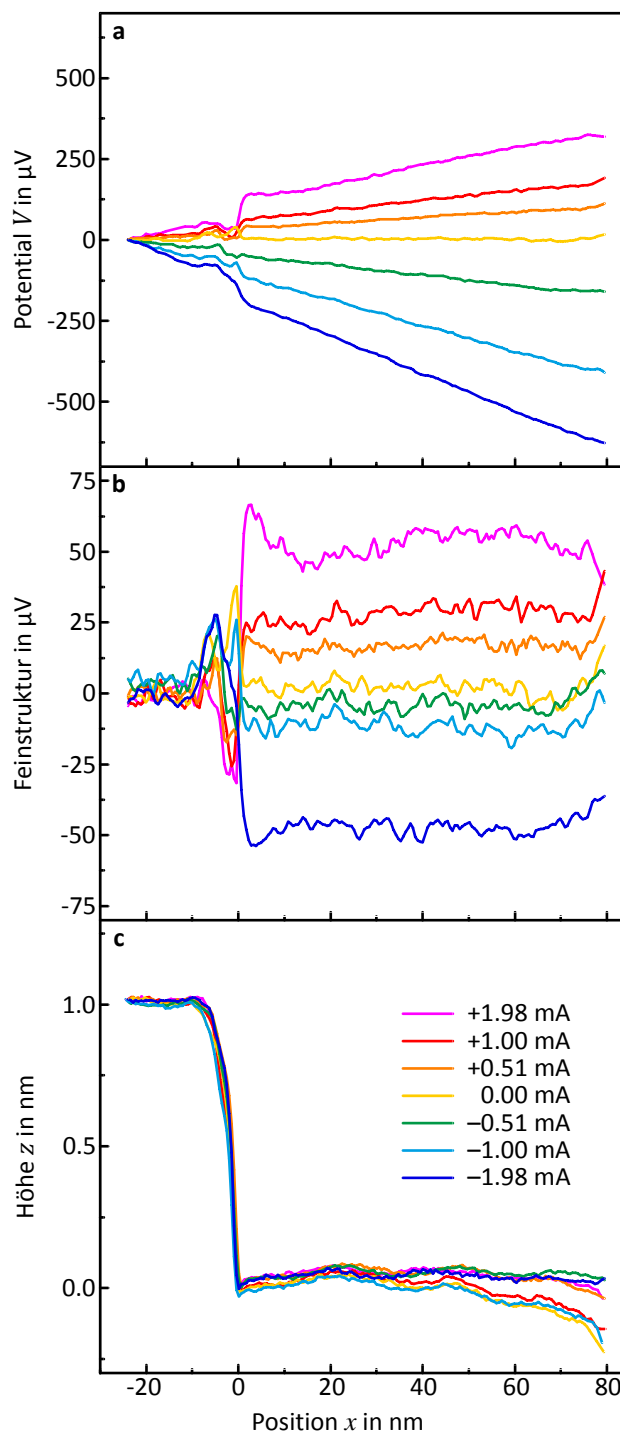


Bild 9.22 | Ergänzende Daten der STP-Studie an der 1 QL-Stufe in Bi_2Te_3 für die negative Scanrichtung. Gezeigt sind die gemittelten Profile für: (a) Potential, (b) Feinstruktur (a mit abgezogenem Terrassengradient) und (c) die zugehörige Topographie (die Stufenkante ist auf $x = 0$ gesetzt).

9.4 Programme für die STP-Datenanalyse

9.4.1 Simulierung von STP-Artefakten

Die Simulation der STP-Artefakte wurde von mir bereits im Rahmen meiner Masterarbeit [15] durchgeführt. Daher folgt dieser Anhang dem entsprechenden Kapitel 5.4 in der Masterarbeit. Die Simulation wurde auf Grundlage der Aussagen in Kapitel 2.1.4 (Abbildungsfehler im STM) und Kapitel 2.2.4 (Artefakte in der STP) zusammen mit R. Möller und T. Möller (Universität Konstanz) während meiner Masterarbeit entwickelt. Zunächst muss, wie in Kapitel 2.1.4 beschrieben, die Verbreiterung der gemessenen Topographie durch die Tunnelspitze beseitigt werden (vgl. Bild 9.23), um die ursprüngliche Probentopographie zu rekonstruieren. Hierfür wird zunächst die gemessene Topographie so bearbeitet, dass Terrassen in der Aufnahme eben erscheinen (vgl. Bild 9.23a).

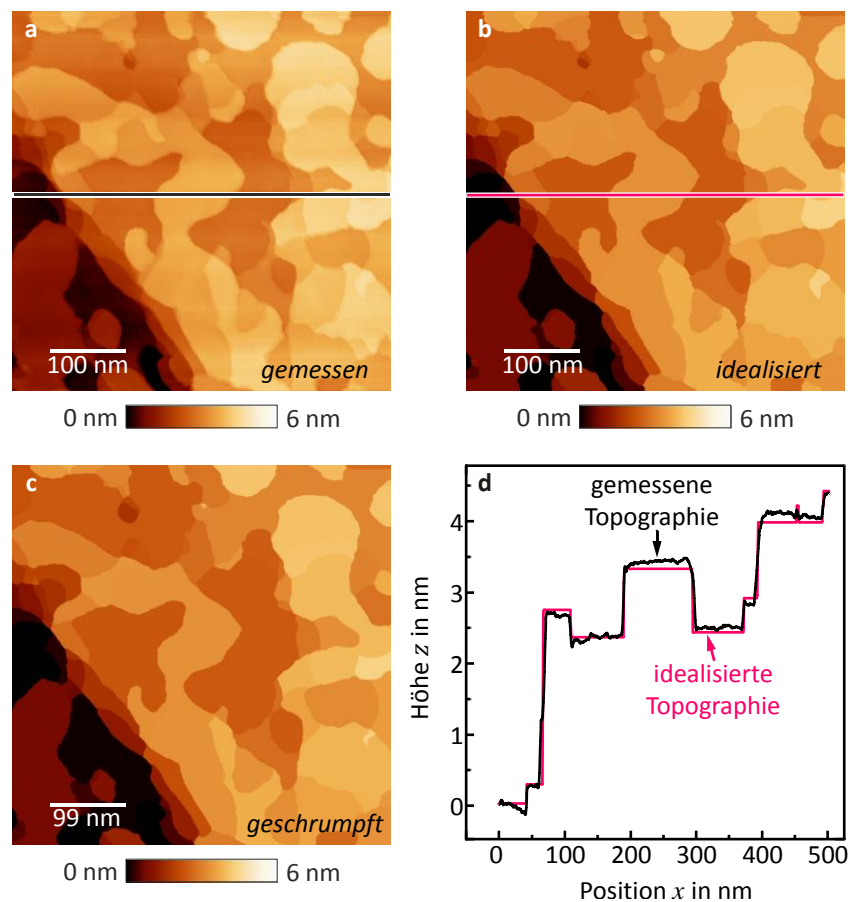


Bild 9.23 | Rekonstruktion der eigentlichen Probentopographie. Die gemessene Topographie (a) wird zunächst in eine idealisierte Form gebracht (b). Anschließend wird der Rand um die vermutete Verbreiterung durch die Tunnelspitze geschrumpft (c), sodass die rekonstruierte Probentopographie erscheint. (d) Vergleich der Profile aus a bzw. b. Darstellung aus [15].

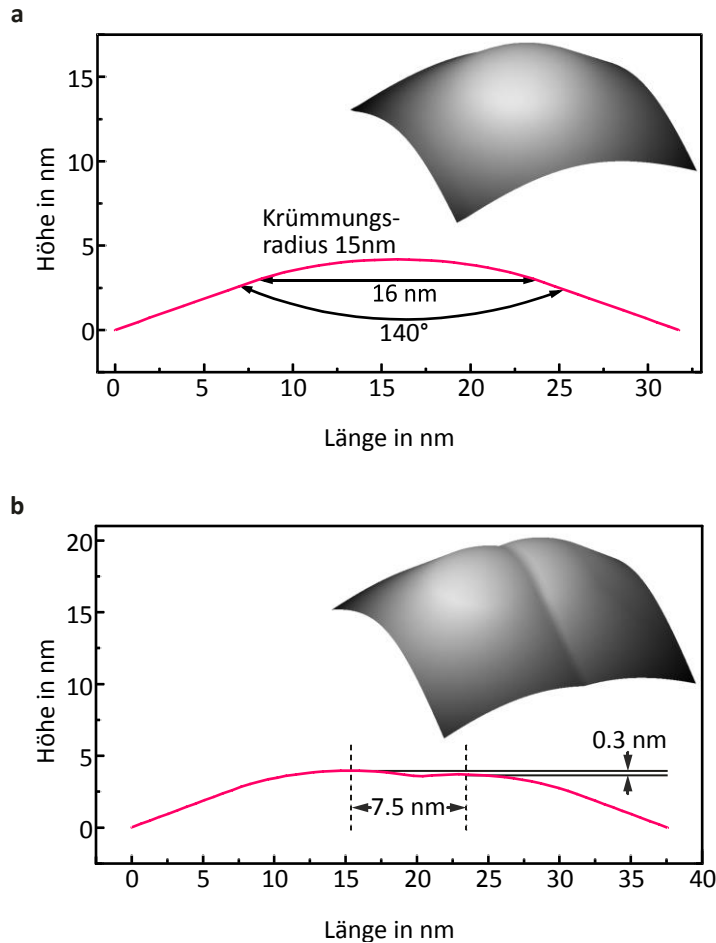


Bild 9.24| Benutzte Spitzenmodelle. Profile und 3D-Darstellung (überhöht) der benutzten Modelle für den Fall (a) einer Einzelspitze und (b) einer Doppelspitze. Darstellung aus [15].

Danach wird über ein Programm die Topographie in eine idealisierte Form überführt. Hierfür werden die Stufenkanten und damit die Terrassenformen bestimmt und die Flächen mit dem Mittelwert der gemessenen Höhe auf der jeweiligen Terrasse gefüllt (siehe Bild 9.23b). Dabei gibt die idealisierte Topographie recht gut die gemessene Topographie wieder (vgl. Bild 9.23d). Aus der Form der Terrassenstufen in der gemessenen Topographie wird gemäß Bild 2.4 die vermutliche Form der Tunnelspitze abgeleitet. Über ein weiteres Programm wird die idealisierte Topographie um die Verbreiterung durch die Tunnelspitze korrigiert (siehe Bild 9.23c). Hierfür wird die Spitze als Zylinder angenähert, um dessen Radius die Terrassen der idealisierten Topographie verkleinert werden.

Um den Abbildungsprozess möglichst getreu simulieren zu können, wurde eine einfache Tunnelspitze und eine Doppelspitze modelliert (siehe auch Bild 9.24). Die Form der Einfachspitze wurde anhand der gemessenen Topographie in Bild 9.23a gemäß der Verbreiterungsform in Bild 2.4 bestimmt: Eine gute Übereinstimmung der späteren STP-Simulation ergibt sich mit einem Konus (Öffnungswinkel 140°), an dessen Ende (Halsradius $r = 8$ nm) eine Kugel mit dem Krümmungsradius $R = 15$ nm als Apex eingepasst ist (vgl. Bild 2.4 und Bild 9.24a). Aus zwei solchen Einzelspitzen wurde eine Doppelspitze gebildet, wobei der Abstand der Apizes 7.5 nm beträgt und sie sich in ihrer Höhe um 0.3 nm unterscheiden. Der gewählte Abstand der beiden Apizes ist gemäß Bild 2.13 so ge-

wählt, das der Gradient aus Bild 5.14d zwischen den Apizes zu einer Spannungsdifferenz führt, die dem Spannungssprung an einer Stufenkante entspricht.

Zur eigentlichen Simulation des Abbildungsvorgangs wird als vorhandenes Transportfeld ein konstanter Gradient benutzt, der die Steigung des gemessenen Potentials aufweist. Die Simulation geschieht folgendermaßen (siehe auch Bild 9.25): Die Tunnelspitze wird in einer konstanten Höhe über die rekonstruierte Probertopographie zeilenweise geführt. Die Höhe der Topographie sei durch $\tilde{z}(\tilde{x}, \tilde{y})$ mit \tilde{x} und \tilde{y} als laterale Oberflächenkoordinate gegeben. Die Oberfläche der Spitze sei durch $z(\tilde{x} - x, \tilde{y} - y)$ mit x und y als bewegte Koordinaten der Spitze gegeben. Dann ergibt sich für jeden Rasterpunkt (x, y) der jeweilige minimale Tunnelabstand z_{sim} zwischen Spitze und Oberfläche zu

$$z_{\text{sim}}(x, y) = \min_{\forall \tilde{x}, \tilde{y}} (z(\tilde{x} - x, \tilde{y} - y) - \tilde{z}(\tilde{x}, \tilde{y})). \quad (9.1)$$

Das Programm für die Simulation benutzt $-z$ statt z , sodass dort eigentlich als Bedingung $z_{\text{sim}} = \min(z - \tilde{z}) = \max(z + \tilde{z})$ genutzt wird. $z_{\text{sim}}(x, y)$ entspricht der benötigten Höhenverschiebung beim STM im Konstant-Strom-Modus, d. h. der im STM aufgenommenen Topographie. Das Potential aus der Oberfläche am Ort des minimalen Tunnelabstands $V(x, y)$ wird gemäß Gleichung (9.1) der entsprechenden Rasterposition der Spitze zugeordnet, sodass sich hieraus das durch die Spitze erfasste Potential $V(x, y)$ ergibt.

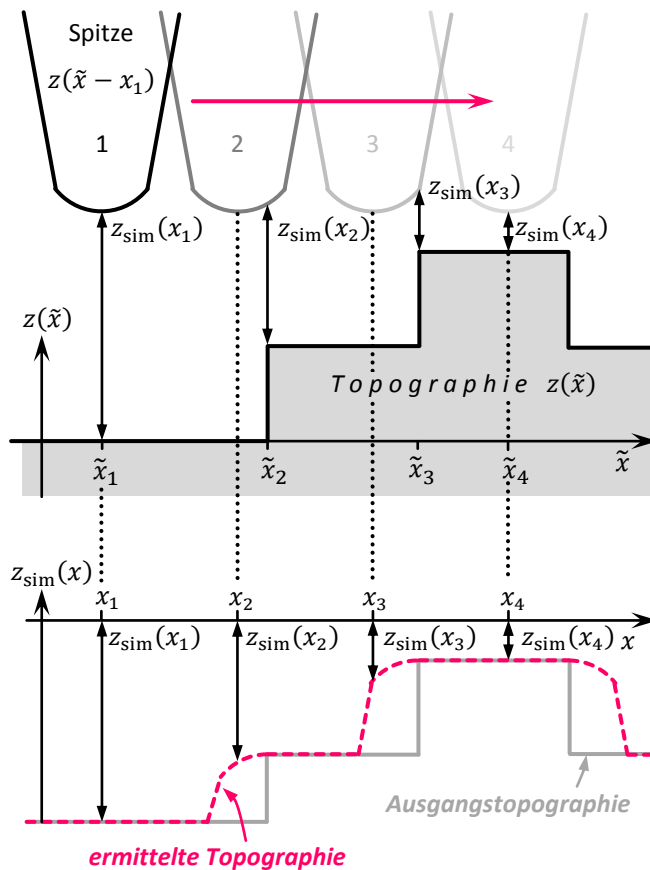


Bild 9.25 | Simulation der Spitzenabbildung. Die Spitze wird in konstanter Höhe über die abzubildende Topographie geführt. Dabei wird der kleinste Abstand z_{sim} (Tunnelpunkt) zwischen Spitze und Topographie berechnet. Wie man sieht, stimmt die Position von z_{sim} und der eigentliche Rasterposition (unterster Punkt des Spitzenapex) nicht immer überein. Es kommt daher zur Verbreiterung der Topographie, wie in Kapitel 2.1.4 besprochen. Darstellung aus [15]

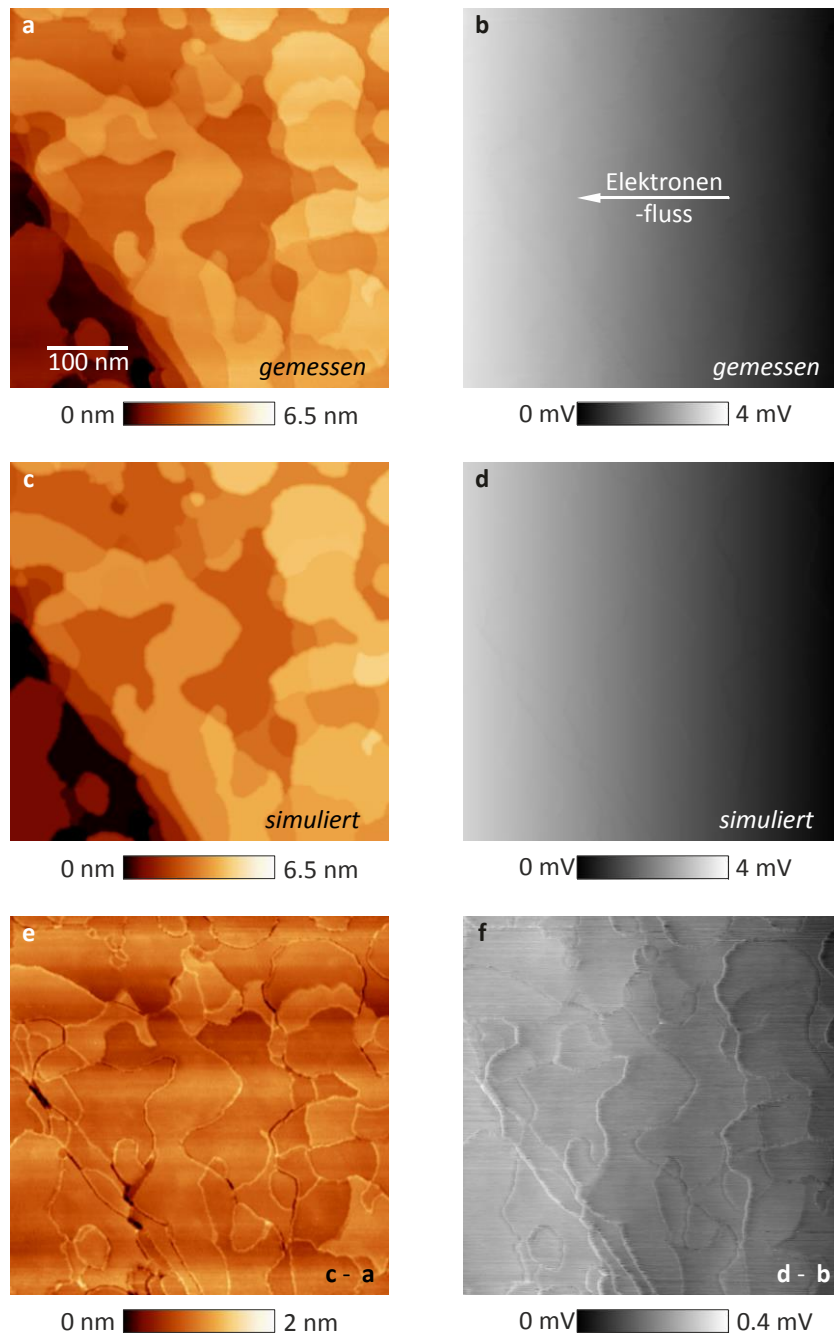


Bild 9.26 | Simulation der Abbildung durch eine Einzelspitze. In **a** bzw. **b** sind die Topographie bzw. das Potential aus der gleichen Messreihe wie bei Bild 5.14 gezeigt ($V_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz , $I_t = 12 \text{ pA}$, $V_{\text{quer}} = -1.29 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1.925 \text{ mA}$, Messung bei RT). In **c** bzw. **d** ist die entsprechende simulierte Topographie bzw. das simulierte Potential im Fall einer Einzelspitze gezeigt, wobei für die Simulation als Ausgangspotential ein konstanter Gradient verwendet wurde. **e** bzw. **f** zeigen die Differenzbilder **a-c** bzw. **b-d**. Darstellung aus [15].

In Bild 9.26 bzw. Bild 9.27 sind die Ergebnisse der Simulation für den Fall einer Einzelspitze bzw. für den Fall einer Doppelspitze gezeigt und werden mit den entsprechenden Messdaten verglichen. Für den Fall einer Einzelspitze scheinen sich die Messung (Bild 9.26a) und die Simulation (Bild 9.26c) kaum voneinander zu unterscheiden, wie man auch anhand des Differenzbild Bild 9.26e erkennt.

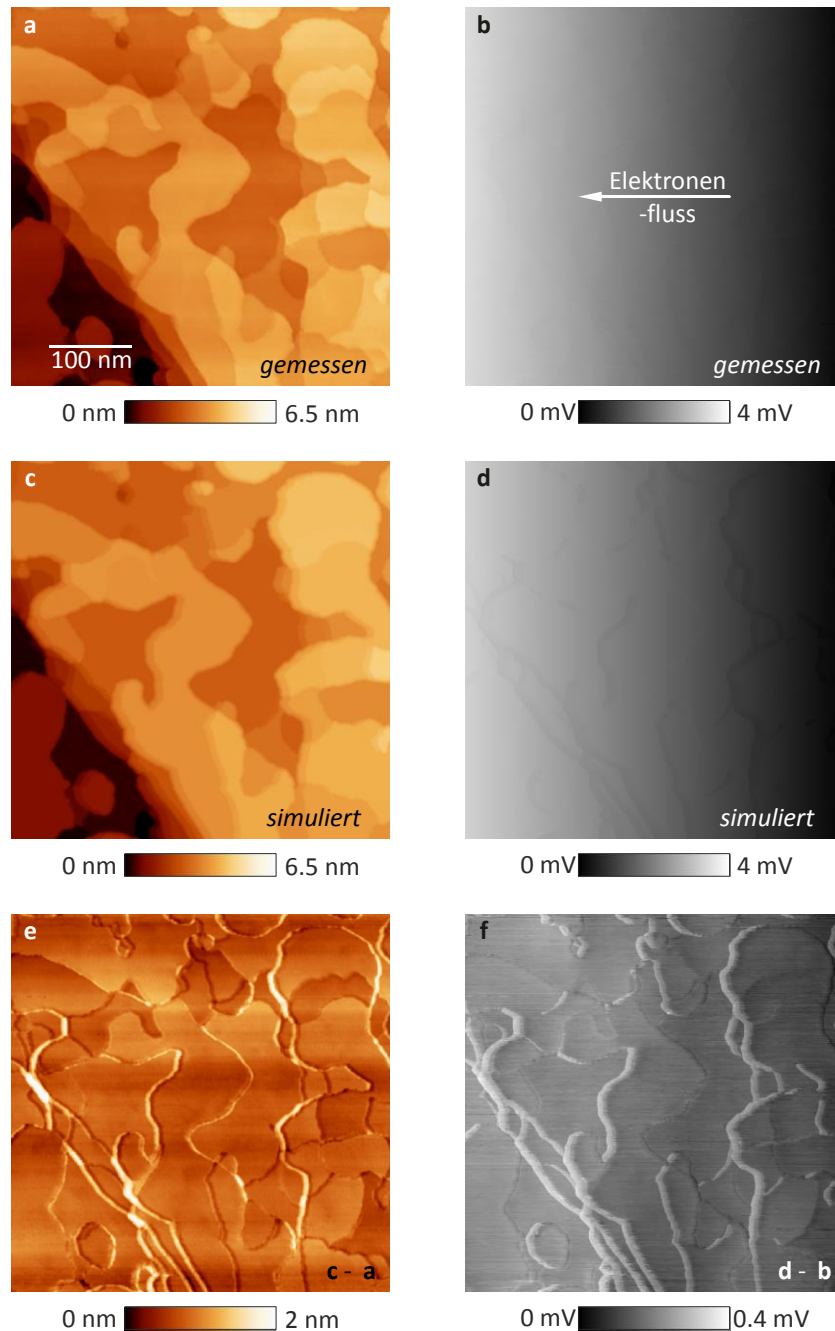


Bild 9.27 | Simulation der Abbildung durch eine Doppelspitze. In **a** bzw. **b** sind die Topographie bzw. das Potential aus der gleichen Messreihe wie bei Bild 5.14 gezeigt ($V_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}_{\text{pp}}$ mit 2.1 kHz , $I_t = 12 \text{ pA}$, $V_{\text{quer}} = -1.29 \text{ V}$ und $I_{\text{quer}} = -1.925 \text{ mA}$, Messung bei RT). In **c** bzw. **d** ist die entsprechende simulierte Topographie bzw. das simulierte Potential im Fall einer Doppelspitze gezeigt, wobei für die Simulation als Ausgangspotential ein konstanter Gradient verwendet wurde. **e** bzw. **f** zeigen die Differenzbilder **a-c** bzw. **b-d**. Darstellung aus [15].

Die vorhandenen Unterschiede beruhen wahrscheinlich auf der Idealisierung der Topographie und Verkleinerung der Terrassen vor der Simulation. Das gemessene (Bild 9.26b) und das simulierte Potential (Bild 9.26d) scheinen sich auch kaum zu unterscheiden. Im Differenzbild (Bild 9.26f) zeigen sich Potentialkinken und die Feinstruktur des gemessenen Potentials.

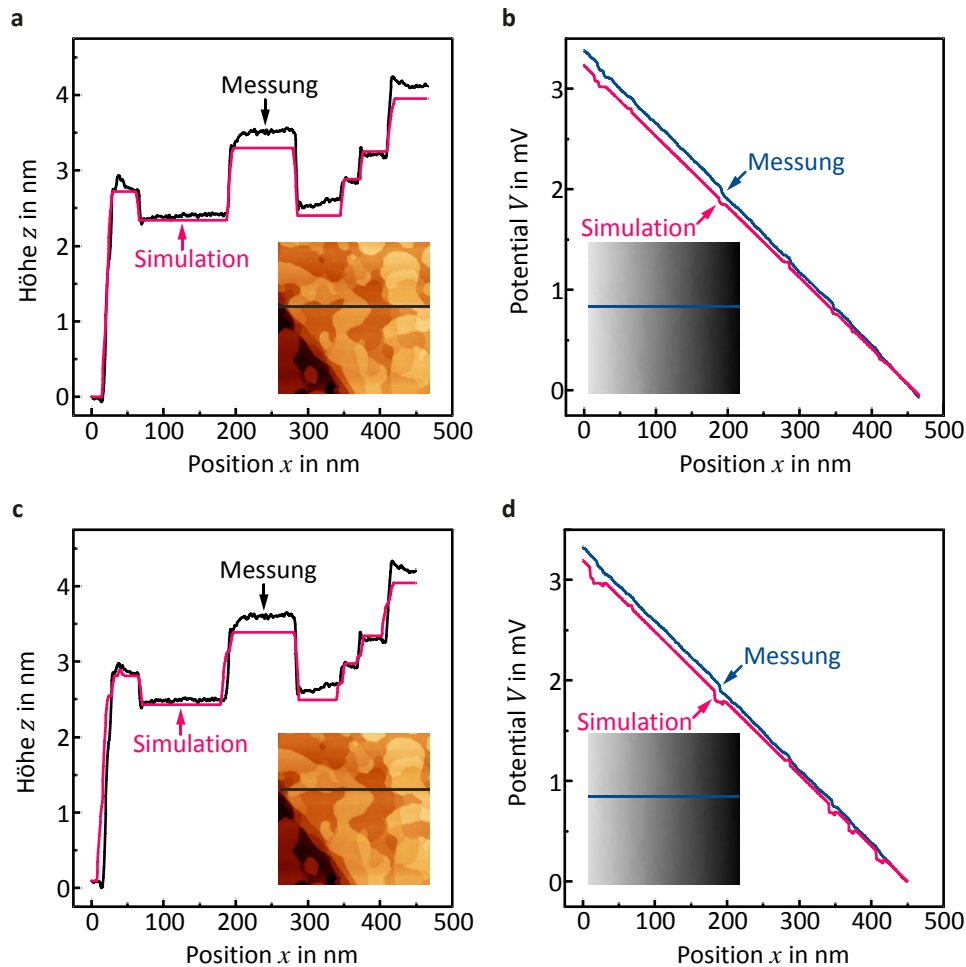


Bild 9.28 | Profile aus Bild 9.26 und Bild 9.27. (a) Vergleich der gemessenen Topographie (Bild 9.26a) mit der für den Fall einer Einzelspitze simulierten Topographie (Bild 9.26c). (b) Zugehöriges gemessenes (Bild 9.26b) und simuliertes Potential (Bild 9.26d). (c) Vergleich der gemessenen Topographie (Bild 9.26a) mit der für den Fall einer Doppelspitze simulierten Topographie (Bild 9.27c). (d) Zugehöriges gemessenes (Bild 9.27b) und simuliertes Potential (Bild 9.27d). Als Ausgangspotential für die Simulation wurde ein konstanter Gradient verwendet. Die Lage der Profile in den Aufnahmen ist in den gezeigten Miniaturen eingezeichnet. Darstellung aus [15].

Da die Feinstruktur weiterhin sichtbar bleibt (vgl. Bild 5.14d), kann sie nicht durch die Abbildung mit der Einzelspitze verursacht sein. Die Potentialkinken sind dagegen auch in schwächerer Form in Bild 5.14d zu sehen und daher wahrscheinlich ein Artefakt der Spitzenbildung. Dies zeigt sich auch in den Profilen in Bild 9.28: Die Topographie von Simulation und Messung stimmen sehr gut überein (Bild 9.28a), im Potential kann jedoch der Potentialsprung an den Stufenkanten in der Simulation nicht reproduziert werden (Bild 9.28b). Bei der Simulation für den Fall einer Doppelspitze zeigen sich starke Diskrepanzen: Weder wird die Topographie richtig wiedergegeben (vgl. Bild 9.27a,c,e und Bild 9.28c) noch kann die Potentialfeinstruktur bzw. der Spannungssprung an den Stufenkanten reproduziert werden (vgl. Bild 9.27b,d,f und Bild 9.28d), sodass auch kein Artefakt einer Doppelspitze vorliegt.

Nachfolgend ist der vollständige C++-Programmtext von R. Möller und T. Möller (Universität Konstanz) für die Rekonstruktion der ursprünglichen Topographie, für die Modellierung der vermuteten Tunnelspitzen und für die Simulation der STP-Messung angehängt:

Programm autotopo6.cpp zur Idealisierung der Topographie (vgl. Bild 9.23b):

```
#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <string>
#include <stdio.h>
#include <sstream>
#include <math.h>

#include "readdatafile2.cpp" //ReadDataFile(...)
#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)
#include "findSteps5.cpp" //findStetps(...)

char line1[121], line2[121], line3[121];
int nrows, ncols;
double x[2000], y[2000], z[2000][2000];
using namespace std;

void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-i [inputfile]" << endl;
    cout << "-o [outputfile]" << endl;
    cout << "-t [threshold]" << endl;
    cout << "-s [minimal number of pixels per plane, optional]" << endl;
}

int main(int argc, char *argv[]){
    string infilename; //FileToRead
    string outfilename; //FileToWrite
    double threshold;
    int minSize = 0;
    // read parameters
    if((argc!=7) && (argc!=9)){
        printHelp();
        return -1;
    }
    int readstatus = 0;
    for(int i = 1; i < argc; i+=2){
        if(strcmp(argv[i], "-i") == 0){
            infilename = argv[i+1];
            readstatus += (1<<0);
        }else if(strcmp(argv[i], "-o") == 0){
            outfilename = argv[i+1];
            readstatus += (1<<1);
        }else if(strcmp(argv[i], "-t") == 0){
            istringstream(argv[i+1]) >> threshold;
            readstatus += (1<<2);
        }else if(strcmp(argv[i], "-s") == 0){
            istringstream(argv[i+1]) >> minSize;
            readstatus += (1<<3);
        }else{
            printHelp();
            return -1;
        }
    }
    if(readstatus != (1<<((argc-1)/2))-1){
        printHelp();
        return -1;
    }
    ReadDataFile(infilename, x, y, z, &nrows, &ncols, line1, line2, line3);
    findSteps4(ncols, nrows, z, threshold, minSize);
    WriteDataFile(outfilename, x, y, z, ncols, nrows, line1, line2, line3);
    return 0;
}
```


Programm shrink2.cpp zur Rekonstruktion der eigentlichen Probenoberfläche (vgl. Bild 9.23d):

```
#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <string>
#include <sstream>
#include <stdio.h>

#include "readdatafile2.cpp" //ReadDataFile(...)
#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
int nrows, ncols;
double x[2000],y[2000],z[2000][2000], top[2000][2000];
using namespace std;

void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-i [input filename]" << endl;
    cout << "-o [output filename]" << endl;
    cout << "-r [radius]" << endl;
}

int main(int argc, char *argv[]){
    string infilename; //FileToRead
    string outfilename; //FileToWrite
    int nradius;
    // read parameters
    if(argc != 7){
        printHelp();
        return -1;
    }
    // read parameters
    int readStatus = 0;
    for(int i = 1; i < argc; i+=2){
        if(strcmp(argv[i],"-i") == 0){
            infilename = argv[i+1];
            readStatus += (1<<0);
        }else if(strcmp(argv[i],"-o") == 0){
            outfilename = argv[i+1];
            readStatus += (1<<1);
        }else if(strcmp(argv[i],"-r") == 0){
            istringstream(argv[i+1]) >> nradius;
            readStatus += (1<<2);
        }else{
            printHelp();
            return -1;
        }
    }
    if(readStatus != (1<<((argc-1)/2))-1){
        printHelp();
        return -1;
    }
    //work...
    ReadDataFile(infilename,x,y,z,&nrows,&ncols,line1,line2,line3);
    int nrowstip = 2*nradius+1;
    int ncolstip = 2*nradius+1;
    nrows-=nrowstip;
    ncols-=ncolstip;
    cout << " calculating...";
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        for(int j=0;j<ncols;j++){
            double zmin = std::numeric_limits<double>::infinity();
            for(int k=0;k<nrowstip;k++){
                for(int l=0;l<ncolstip;l++){
                    double ztip;
                    if((k-nrowstip/2)*(k-nrowstip/2)+(l-ncolstip/2)*(l-ncolstip/2)
>= nradius*nradius) {
                        ztip=-std::numeric_limits<double>::infinity();
                    }else{
                        ztip=0;
                    }
                    if (z[i+k][j+l]-ztip < zmin){
                        zmin=z[i+k][j+l]-ztip;
                    }
                }
            }
        }
    }
}
```

```

    }
    top[i][j]=zmin;
}
cout << "\r calculating..." << 100*i/nrows << "%";
}
cout << "\r calculating...done" << endl;
WriteDataFile(outfilename,x,y,top,nrows,ncols,line1,line2,line3);
return 0;
}

```

Programm create_tip_cone_cap.cpp zur Modellierung der Tunnelspitze (vgl. Bild 9.24):

```

#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <sstream>
#include <fstream>
#include <string>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define PI 3.14159265

#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
int nrows, ncols;
double x[2000],y[2000],z[2000][2000], dx, dy, delta;
using namespace std;
void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-o [output file]" << endl;
    cout << "-w [number of points in x-direction]" << endl;
    cout << "-h [number of points in y-direction]" << endl;
    cout << "-d [delta x step seize in x- and y- direction in Angstroem]" << endl;
    cout << "-t [pos x] [pos y] [height] [radius] [radiusneck] [cone angle] (may
be used multiple times)" << endl;
}
int main(int argc, char *argv[]){
    string outfilename; //FileToWrite
    //produce header
    //infilename="header.txt";
    //ReadHeader(infilename,line1,line2,line3);
    strcpy(line1,"WSxM file copyright Nanotec Electronica");
    strcpy(line2,"WSxM ASCII XYZ file");
    strcpy(line3,"X[\305]\t\tY[\305]\t\tZ[\305]");
    if(argc < 9 || (argc-9)%7 != 0){
        printHelp();
        return -1;
    }
    // read necessary arguments
    int readstatus = 0;
    for(int i = 1; i < argc; i++){
        if(strcmp(argv[i],"-o") == 0){
            outfilename = argv[i+1];
            readstatus += (1<<0);
            break;
        }
    }
    for(int i = 1; i < argc; i++){
        if(strcmp(argv[i],"-w") == 0){
            istringstream(argv[i+1]) >> ncols;
            readstatus += (1<<1);
            break;
        }
    }
    for(int i = 1; i < argc; i++){
        if(strcmp(argv[i],"-h") == 0){
            istringstream(argv[i+1]) >> nrows;
            readstatus += (1<<2);
            break;
        }
    }
    for(int i = 1; i < argc; i++){

```

```

        if(strcmp(argv[i],"-d") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> delta;
            readstatus += (1<<3);
            break;
        }
    }
    if(readstatus != (1<<4)-1){
        printHelp();
        return -1;
    }
    // create grid
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        y[i]=i*delta;
    }
    for(int j=0;j<ncols;j++){
        x[j]=j*delta;
    }
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        for(int j=0;j<ncols;j++){
            z[i][j]=-numeric_limits<double>::infinity();
        }
    }
    //read tips
    int argsRead = 0;
    while(argsRead < argc-1){
        if(strcmp(argv[++argsRead],"-t") != 0) continue;
        int nx,ny;
        double height,radius,angle,rneck,zneck,slope;
        istream(argv[argsRead+1]) >> dx;
        istream(argv[argsRead+2]) >> dy;
        istream(argv[argsRead+3]) >> height;
        istream(argv[argsRead+4]) >> radius;
        istream(argv[argsRead+5]) >> rneck;
        istream(argv[argsRead+6]) >> angle;
        argsRead+=6;
        nx = dx /delta;
        ny = dy /delta;
        slope=tan((90-angle/2)*PI/180);
        zneck=sqrt(radius*radius-rneck*rneck)-radius;
        for(int i=0;i<nrows;i++){
            for(int j=0;j<ncols;j++){
                double znew;
                if(sqrt(((j-nx)-ncols/2)*((j-nx)-ncols/2)+((i-ny)-nrows/2)*((i-ny)-nrows/2))*delta < rneck){
                    znew= sqrt(radius*radius-(((j-nx)-ncols/2)*((j-nx)-ncols/2)+((i-ny)-nrows/2)*((i-ny)-nrows/2))*delta*delta) - radius + height;
                }else{
                    znew=-slope*(sqrt(((j-nx)-ncols/2)*((j-nx)-ncols/2)+((i-ny)-nrows/2)*((i-ny)-nrows/2))*delta - rneck) + zneck + height;
                }
                if(znew > z[i][j]) z[i][j] = znew;
            }
        }
        WriteDataFile(outfilename,x,y,z,nrows,ncols,line1,line2,line3);
        return 0;
    }
}

```

Programm `create_pot3.cpp` zur Bereitstellung des Ausgangspotentials für die Simulation:

```

#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <sstream>
#include <string>
#include <stdio.h>

#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
int nrows, ncols;
double x[2000],y[2000],z[2000][2000], delta;
using namespace std;

```

```

void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-o [output file]" << endl;
    cout << "-sx [slope in x-direction]" << endl;
    cout << "-sy [slope in y-direction]" << endl;
    cout << "-w [points in x-direction]" << endl;
    cout << "-h [points in y-direction]" << endl;
    cout << "-d [delta x step seize in x- and y- direction in Angstroem]" << endl;
}
int main(int argc, char *argv[]){
    double mx, my;
    string filename; //Basename
    string filename2; //finalBasename
    string filename3; //finalBasename
    string infilename; //FileToRead
    string outfilename; //FileToWrite
    //produce header
    //infilename="header.txt";
    //ReadHeader(infilename,line1,line2,line3);
    strcpy(line1,"WSxM file copyright Nanotec Electronica");
    strcpy(line2,"WSxM ASCII XYZ file");
    strcpy(line3,"X[\305]\t\tY[\305]\t\tZ[\305]");
    // read parameters
    int readstatus = 0;
    if(argc != 13){
        printHelp();
        return -1;
    }
    for(int i = 1; i < 13; i+=2){
        if(strcmp(argv[i],"-o") == 0){
            outfilename = argv[i+1];
            readstatus += (1<<0);
        }else if(strcmp(argv[i],"-sx") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> mx;
            readstatus += (1<<1);
        }else if(strcmp(argv[i],"-sy") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> my;
            readstatus += (1<<2);
        }else if(strcmp(argv[i],"-w") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> ncols;
            readstatus += (1<<3);
        }else if(strcmp(argv[i],"-h") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> nrows;
            readstatus += (1<<4);
        }else if(strcmp(argv[i],"-d") == 0){
            istream(argv[i+1]) >> delta;
            readstatus += (1<<5);
        }else{
            printHelp();
            return -1;
        }
    }
    if(readstatus != (1<<((argc-1)/2))-1){
        printHelp();
        return -1;
    }
    // create data
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        y[i]=i*delta;
    }
    for(int j=0;j<ncols;j++){
        x[j]=j*delta;
    }
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        for(int j=0;j<ncols;j++){
            z[i][j]=(i-nrows/2)*my*delta + (j-ncols/2)*mx*delta;
        }
    }
    WriteDataFile(outfilename,x,y,z,nrows,ncols,line1,line2,line3);
    return 0;
}

```

Programm tip_simul2.cpp zur Simulation der STP-Messung (siehe auch Bild 9.25):

```

include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <string>
#include <stdio.h>

#include "readdatafile2.cpp" //ReadDataFile(...)
#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
double x[2000],y[2000],z[2000][2000], xpot[2000],ypot[2000],
xtip[2000],ytip[2000],ztip[2000][2000], pot[2000][2000], top[2000][2000],
v[2000][2000];

using namespace std;

void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-is [filename of topo input file]" << endl;
    cout << "-ip [filename of potential input file]" << endl;
    cout << "-it [filename of tip input file]" << endl;
    cout << "-ot [filename of topo output file]" << endl;
    cout << "-op [filename of potential output file]" << endl;
}

int main(int argc, char *argv[]){
    int nrows, ncols, nrowssurf, ncolssurf, nrowspot, ncolspot, nrowstip,
    ncolstip;
    string infilenameSurface; //topo input filename
    string infilenamePotential; //potential input filename
    string infilenameTip; //tip input filename
    string outfilenameTopo; //topo outfilename
    string outfilenameVoltage; //potential outfilename
    int readstatus = 0;
    if(argc != 11){
        printHelp();
        return -1;
    }
    for(int i = 1; i < 11; i+=2){
        if(strcmp(argv[i],"-is") == 0){
            infilenameSurface = argv[i+1];
            readstatus += (1<<0);
        }else if(strcmp(argv[i],"-ip") == 0){
            infilenamePotential = argv[i+1];
            readstatus += (1<<1);
        }else if(strcmp(argv[i],"-it") == 0){
            infilenameTip = argv[i+1];
            readstatus += (1<<2);
        }else if(strcmp(argv[i],"-ot") == 0){
            outfilenameTopo = argv[i+1];
            readstatus += (1<<3);
        }else if(strcmp(argv[i],"-op") == 0){
            outfilenameVoltage = argv[i+1];
            readstatus += (1<<4);
        }else{
            printHelp();
            return -1;
        }
    }
    if(readstatus != (1<<((argc-1)/2))-1){
        printHelp();
        return -1;
    }
    ReadDataFile(infilenameSurface,x,y,z,&nrowssurf,&ncolssurf,line1,line2,line3);
    ReadData-
    File(infilenamePotential,xpot,ypot,pot,&nrowspot,&ncolspot,line1,line2,line3);
    ReadData-
    File(infilenameTip,xtip,ytip,ztip,&nrowstip,&ncolstip,line1,line2,line3);
    nrows=nrowssurf-nrowstip;
    ncols=ncolssurf-ncolstip;
    for(int i=0;i<nrows;i++){
        for(int j=0;j<ncols;j++){
            int kmax=i;
            int lmax=j;
            double zmax= z[i][j]+ztip[0][0];

```

```

        for(int k=0;k<nrowstip;k++){
            for(int l=0;l<ncolstip;l++){
                if(z[i+k][j+l]+ztip[k][l] > zmax){
                    kmax=i+k;
                    lmax=j+l;
                    zmax=z[i+k][j+l]+ztip[k][l];
                }
            }
        }
        top[i][j]=zmax;
        v[i][j]=pot[kmax][lmax];
    }
}
WriteDataFile(outfilenameTopo,x,y,top,nrows,ncols,line1,line2,line3);
WriteDataFile(outfilenameVoltage,x,y,v,nrows,ncols,line1,line2,line3);
return 0;
}

```

Programm `optimal_reduce_2.cpp` zum Anpassen der Bildgröße von Messung und Simulation:

```

#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <sstream>
#include <string>
#include <stdio.h>
#include <sstream>
#include <cmath>

#include "readdatafile2.cpp" //ReadDataFile(...)
#include "writedatafile2.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
int nrows1, ncols1;
int nrows2, ncols2;
int nrows3, ncols3;
int nrowsoff, ncolsoff;
double x1in[2000],y1in[2000],z1in[2000][2000];
double x2in[2000],y2in[2000],z2in[2000][2000];
double x3in[2000],y3in[2000],z3in[2000][2000];
double xout[2000],yout[2000],zout[2000][2000];
using namespace std;
void printHelp(){
    cout << "usage:" << endl;
    cout << "-il [larger file]" << endl;
    cout << "-is [smaller file]" << endl;
    cout << "-o [output reduced larger file]" << endl;
    cout << "-ia [additional data connected to the larger file, optional]" <<
endl;
    cout << "-oa [output of the additional reduced file, required if ia is used]"
<< endl;
}
int main(int argc, char *argv[]){
    string infilename; //FileToRead
    string infilename2; //Second FileToRead
    string infilename3; //Third FileToRead
    string outfilename; //FileToWrite
    string outfilename2; //Second FileToWrite
    double offset, difference, differenceUp, differenceDown, differenceLeft, dif-
ferenceRight, differenceold;
    if(argc != 7 && argc != 11){
        printHelp();
        return -1;
    }
    // read parameters
    int readStatus = 0;
    for(int i = 1; i < argc; i+=2){
        if(strcmp(argv[i],"-il") == 0){
            infilename = argv[i+1];
            readStatus += (1<<0);
        }else if(strcmp(argv[i],"-is") == 0){
            infilename2 = argv[i+1];
            readStatus += (1<<1);
        }
    }
}

```



```

}else if(strcmp(argv[i],"-o") == 0){
    outfilename = argv[i+1];
    readStatus += (1<<2);
}else if(strcmp(argv[i],"-ia") == 0){
    infilename3 = argv[i+1];
    readStatus += (1<<3);
}else if(strcmp(argv[i],"-oa") == 0){
    outfilename2 = argv[i+1];
    readStatus += (1<<4);
}else{
    printHelp();
    return -1;
}
}
if(readStatus != (1<<((argc-1)/2))-1){
    printHelp();
    return -1;
}
//work...
ReadDataFile(infilename,xlin,ylin,zlin,&nrows1,&ncols1,line1,line2,line3);
ReadDataFile(infilename2,x2in,y2in,z2in,&nrows2,&ncols2,line1,line2,line3);
nrowsoff = (nrows1 - nrows2)/2;
ncolsoff = (ncols1 - ncols2)/2;
// calculation of the mean difference between both data sets
offset=0;
for(int i=0;i<nrows2;i++){
    for(int j=0;j<ncols2;j++){
        offset += zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff]-z2in[i][j];
    }
}
offset = offset/(nrows2*ncols2);
// calculation of the sum osolute values of the difference between both data
sets, value to be otpimized
difference = 0;
for(int i=0;i<nrows2;i++){
    for(int j=0;j<ncols2;j++){
        difference += abs(zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff]-z2in[i][j]-offset);
    }
}
differenceold = difference;
for(int k=0; k<100; k++){
    differenceUp = 0;
    differenceDown = 0;
    differenceLeft = 0;
    differenceRight = 0;
    for(int i=0;i<nrows2;i++){
        for(int j=0;j<ncols2;j++){
            differenceUp += abs(zlin[i+nrowsoff+1][j+ncolsoff]-z2in[i][j] -
offset);
            differenceDown += abs(zlin[i+nrowsoff-1][j+ncolsoff]-z2in[i][j] -
offset);
            differenceLeft += abs(zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff-1]-z2in[i][j] -
offset);
            differenceRight += abs(zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff+1]-z2in[i][j] -
offset);
        }
    }
    if(difference > differenceUp) difference = differenceUp;
    if(difference > differenceDown) difference = differenceDown;
    if(difference > differenceLeft) difference = differenceLeft;
    if(difference > differenceRight) difference = differenceRight;
    if(difference == differenceold) break;
    if(difference == differenceUp) nrowsoff++;
    if(difference == differenceDown) nrowsoff--;
    if(difference == differenceLeft) ncolsoff--;
    if(difference == differenceRight) ncolsoff++;
    if(nrowsoff < 0 || nrowsoff > nrows1-nrows2 || ncolsoff < 0 || ncolsoff >
ncols1-ncols2){
        cout << "no minimum found !!!"<< endl;
        return -1;
    }
    offset=0;
    for(int i=0;i<nrows2;i++){
        for(int j=0;j<ncols2;j++){
            offset += zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff]-z2in[i][j];
        }
    }
}

```

```

        offset = offset/(nrows2*ncols2);
        differenceold = difference;
        cout << difference << "\t" << nrowsoff << "\t" << ncolsoff << endl;
    }
    for(int i=0;i<nrows2;i++){
        yout[i]=ylin[i+nrowsoff]-ylin[nrowsoff];
    }
    for(int j=0;j<ncols2;j++){
        xout[j]=xlin[j+ncolsoff]-xlin[ncolsoff];
    }
    for(int i=0;i<nrows2;i++){
        for(int j=0;j<ncols2;j++){
            zout[i][j]=zlin[i+nrowsoff][j+ncolsoff];
        }
    }
    WriteDataFile(outfilename,xout,yout,zout,ncols2,nrows2,line1,line2,line3);
    if(argc == 11){
        ReadData-
File(infilename3,x3in,y3in,z3in,&nrows3,&ncols3,line1,line2,line3);
        for(int i=0;i<nrows2;i++){
            yout[i]=y3in[i+nrowsoff]-y3in[nrowsoff];
        }
        for(int j=0;j<ncols2;j++){
            xout[j]=x3in[j+ncolsoff]-x3in[ncolsoff];
        }
        for(int i=0;i<nrows2;i++){
            for(int j=0;j<ncols2;j++){
                zout[i][j]=z3in[i+nrowsoff][j+ncolsoff];
            }
        }
    }
    WriteData-
File(outfilename2,xout,yout,zout,ncols2,nrows2,line1,line2,line3);
    return 0;
}

```

Nebenprogramm readdatafile2.cpp zum Auslesen von Datensätzen:

```

using namespace std;

void ReadDataFile(string infilename,double xarray[2000],double yarray[2000],double
zarray[2000][2000],int *nrows, int *ncols,char line1[121],char line2[121],char
line3[121]){
    double xx, yy, zz, xxold, yyold, zzold;
    int i,j,g;
    ifstream InFile;
    InFile.open(infilename.c_str());
    // check for errors!
    if (!InFile)
    {
        cout << "error opening file \"" << infilename << "\"\n";
        exit(2);
    }
    // read data
    //read the first three lines
    InFile.getline(line1,120);
    //    cout << line1 << endl;
    InFile.getline(line2,120);
    //    cout << line2 << endl;
    InFile.getline(line3,120);
    //    cout << line3 << endl;
    i=0;
    j=0;
    xxold=0;
    yyold=0;
    zzold=0;
    cout << " reading file " << infilename << ":line" << i;
    for(g=0;g<4000000;g++)
    {
        InFile >> xx >> yy >> zz;
    }
    // Check for end of file
    if(xx==xxold&&g>0) break;
    // Check for end of line

```

```

        if(xx<xxold&&g>1)
        {
            i++;
            cout << "\r reading file " << infilename << ":line" << i;
            j = 0;
        }
        xarray[j] = xx;
        yarray[i] = yy;
        zarray[i][j] = zz;
        j++;
        xxold = xx;
        yyold = yy;
        zzold = zz;
    }
    *nrows = i + 1;
    *ncols = j;
    cout << "\r reading file " << infilename << ":done" << endl;
    cout << " number of rows = "<< *nrows << "      number of columns = "<< *ncols
<< endl;
// close file
    InFile.close();
}

```

Nebenprogramm writedatafile2.cpp zum Ablegen von Datensätzen:

```

using namespace std;

void WriteDataFile(string outfilename, double x[2000], double y[2000], double
z[2000][2000], int ncols, int nrows, char line1[121], char line2[121], char
line3[121]){
    int i,j;
    ofstream OutFile(outfilename.c_str());
    // check for errors
    if (!OutFile){
        cout << "error opening file!\n";
        exit (1);
    }
    // write data
    OutFile << line1 << endl;
    OutFile << line2 << endl;
    OutFile << line3 << endl;
    cout << " number of rows = "<< nrows << "      number of columns = "<< ncols <<
endl;
    cout << " writing file " << outfilename;
    for(i=0;i<nrows;i++){
        for(j=0;j<ncols;j++){
            OutFile << x[j] << " " << y[i] << " " << z[i][j]<< endl;
        }
        cout << "\r writing file " << outfilename << ": " << 100*i/nrows << "%";
    }
    cout << "\r writing file " << outfilename << ": done" << endl;
}

```

9.4.2 Auswertungshilfe für Stufenkantenmessungen

Die Stufenkantenauswertung wurde für die Ausrichtung der Messdaten von QL-Stufen in Bi_2Se_3 (Kapitel 5.3.4) und Bi_2Te_3 (Kapitel 6.1.5) senkrecht zur Scanrichtung benutzt. Hierfür bestimmt das Programm in der Topographie der STP-Aufnahmen die Position der Stufenkante, indem es den größten Gradienten ermittelt, und legt die Position der Maximalwerte auf eine gerade Linie. Die zugehörigen Scanzeilen in der Potentialaufnahme werden dabei simultan an die gleiche Position wie die Scanzeilen der Topographie verschoben. Hierdurch kann die Stufenkante begradigt werden (vgl. z. B. Aufnahmen in Bild 5.17a), wobei die bearbeiteten Aufnahmen durch den Wegschnitt der überzähligen Zeilenenden etwas kürzer sind als die originalen Aufnahmen. Das zur Auswertung gehörige C++-Programm wurde von R. Möller entwickelt:

Hauptprogramm:

```
#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <fstream>
#include <string>
#include <stdio.h>

#include "readparameters.cpp" //ReadParameters(...)
#include "printnames.cpp" //PrintNames(...)
#include "readdatafile.cpp" //ReadDataFile(...)
#include "findstep.cpp" //findstep(...)
#include "badlines.cpp" //BadLines(...) KnownBadLines(...)
#include "minmax.cpp" //LookingForMinMax(...)
#include "writeparams.cpp" //WriteParams(...)
#include "adjustlines.cpp" //AdjustLines(...)
#include "writedatafile.cpp" //WriteDataFile(...)

char line1[121],line2[121],line3[121];
char filename[120],filename2[120], infilename[120], outfile[120], file-
number[33],lastfilename[33];
int i,ii,j,k,number, ifirst, ilast;
long g;
int nrows, nstepmean, nrownew, ncols, updown, ndiff, nx, nfile;
int nstep[2000], ndistleft, ndistrigh, minimumtotal, maximumtotal,deltamax;
int keep[2000];
double xx, yy, zz, xxold, yyold, zzold;
double x[2000],y[2000],z[2000][2000];
double zadj[2000][2000],zaverage[2000],xadj[2000];
double zdifffstep[2000], dev, dev2, zdifffstepmean, limit, zdifflimit;
using namespace std;
int main(int argc, char *argv[]){
    int i;
    string filename; //Basename
    string filename2; //finalBasename
    string infilename; //FileToRead
    string outfile; //FileToWrite
    // read parameters
    ReadParameters(&filename,&filename2,&ifirst,&ilast,&updown,&ndiff,&limit);
    // read data file
    ndistleft=2000;
    ndistrigh=2000;
    for(nfile=ifirst;nfile<=ilast;nfile++){
        cout << endl;
        cout << "number of file = "<< nfile;
        itoa (nfile,filename2,10);
        infilename=filename+filename2+".txt";
        outfile=filename+filename2+"_out.txt";
        PrintNames(infilename,outfile);
```

```

    ReadDataFile(infile, x, y, z, &nrows, &ncols, line1, line2, line3);
    FindStep(nstep, z, nrows, ncols, zdiffstep, &zdifflimit, limit, ndiff, updown);
    BadLines(zdiffstep, z, nstep, keep, nrows, ncols, &nrowsnew, updown,
zdifflimit);
    LookingForMinMax(&nstepmean, &zdiffstepmean, nrowsnew, nstep, zdiffstep,
keep, &ndistleft, &ndistright, ncols, nrows);
    WriteParams(nstepmean, ndistleft, ndistright, zdiffstepmean, zdifflimit);
    AdjustLines(zadj, xadj, z, x, nstep, ndistleft, deltamax, nrowsnew, ncols);
}
cout << "distance to left margin = ";
cout << ndistleft << endl;
cout << "distance to right margin = ";
cout << ndistright << endl;
// how to stop continuation
cout << endl;
cout << "press ctrl + c" << endl << "to stop continuation" << endl;
cout << endl;
//second run through the data
for(nfile=ifirst;nfile<=ilast;nfile++){
    cout << endl;
    cout << "number of file = " << nfile;
    itoa (nfile, filename, 10);
    infile = filename + filename + ".txt";
    outfile = filename + filename + "_out.txt";
    PrintNames(infile, outfile);
    ReadDataFile(infile, x, y, z, &nrows, &ncols, line1, line2, line3);
    FindStep(nstep, z, nrows, ncols, zdiffstep, &zdifflimit, limit, ndiff, updown);
    BadLines(zdiffstep, z, nstep, keep, nrows, ncols, &nrowsnew, updown,
zdifflimit);
    LookingForMinMax(&nstepmean, &zdiffstepmean, nrowsnew, nstep, zdiffstep,
keep, &ndistleft, &ndistright, ncols, nrows);
    WriteParams(nstepmean, ndistleft, ndistright, zdiffstepmean, zdifflimit);
    AdjustLines(zadj, xadj, z, x, nstep, ndistleft, deltamax, nrowsnew, ncols);
    WriteData-
File(outfile, line1, line2, line3, xadj, y, zadj, ndistleft, ndistright, nrowsnew);
    // how to stop continuation
    cout << endl;
    cout << "press ctrl + c" << endl << "to stop continuation" << endl;
    cout << endl;
    // parameters for second set of data files
    infile = filename2 + filename + ".txt";
    outfile = filename2 + filename + "_out.txt";
    PrintNames(infile, outfile, true);
    ReadDataFile(infile, x, y, z, &nrows, &ncols, line1, line2, line3);
    KnownBadLines(keep, z, nrows, ncols);
    AdjustLines(zadj, xadj, z, x, nstep, ndistleft, deltamax, nrowsnew, ncols);
    WriteData-
File(outfile, line1, line2, line3, xadj, y, zadj, ndistleft, ndistright, nrowsnew);
}

system("PAUSE");
return 0;
}

```

Nebenprogramm readparameters.cpp:

```

using namespace std;
void ReadParameters(string filename[120], string filename2[120], int
*NumberOfFirstFile, int *NumberOfLastFile, int *direction, int *ndiff, double
*limit){
    char filename[33];
    string infile;
    string outfile;
    cout << " base name of input file? (without extension)" << endl;
    cin >> filename;
    cout << " enter first file number: " << endl;
    cin >> *NumberOfFirstFile;
    itoa (*NumberOfFirstFile, filename, 10);
    cout << " enter last file number: " << endl;
    cin >> *NumberOfLastFile;
    infile = filename + filename + ".txt";
    outfile = filename + filename + "_out.txt";
    cout << endl;
    cout << " name of first input file" << endl;
}

```

```

    cout << infilename << endl;
    cout << endl;
    cout << " name of first output file" << endl;
    cout << outfilename << endl;
    cout << " step up or down ? (from left to right upwards +1, downwards -1) " <<
endl;
    cin >> *direction;
    if(*direction>0){
        *direction = 1;
        cout << " upwards" << endl;
    }
    else{
        *direction = -1;
        cout << " downwards" << endl;
    }
    cout << " window size for smoothed differentiation? (1..10)" << endl;
    cin >> *ndiff;
    cout << " limit in % of mean value of maximum, minimum? " << endl;
    cout << "(0% no discrimination 100% strongest discr.) typical value
50%" << endl;
    cin >> *limit;
    cout << " limit in % of mean value of maximum, minimum = "<< *limit << "%" << endl;
    cout << " base name of second input file? (without extension)" << endl;
    cin >> *filename2;
    infilename = *filename2 + filename + ".txt";
    outfilename = *filename2 + filename + "_out.txt";
    cout << endl;
    cout << " name of second input file" << endl;
    cout << infilename << endl;
    cout << endl;
    cout << " name of second output file" << endl;
    cout << outfilename << endl;
}

```

Nebenprogramm printnames.cpp:

```

using namespace std;

void PrintNames(string infile, string outfile, bool secondset=true){
    cout << endl;
    if(secondset==true){
        cout << " name of second input file" << endl;
    }
    else{
        cout << " name of input file" << endl;
    }
    cout << infile << endl;
    cout << endl;
    if(secondset==true){
        cout << " name of second output file" << endl;
    }
    else{
        cout << " name of output file" << endl;
    }
    cout << outfile << endl;
}

```

Nebenprogramm readdatafile.cpp:

```

using namespace std;

void ReadDataFile(string infilename, double xarray[2000], double yarray[2000], double
zarray[2000][2000], int *nrows, int *ncols, char line1[121], char line2[121], char
line3[121]){
    double xx, yy, zz, xxold, yyold, zzold;
    int i, j, g;
    ifstream InFile;
    InFile.open(infilename.c_str());
    // check for errors!
    if (!InFile)
    {

```



```

        cout << "error opening file!\n";
        exit(2);
    }
    // read data

    //read the first three lines
    InFile.getline(line1,120);
    //    cout << line1 << endl;
    InFile.getline(line2,120);
    //    cout << line2 << endl;
    InFile.getline(line3,120);
    //    cout << line3 << endl;
    i=0;
    j=0;
    xxold=0;
    yyold=0;
    zzold=0;
    for(g=0;g<4000000;g++)
    {
        InFile >> xx >> yy >> zz;
    // Check for end of file
        if(xx==xxold&&g>0) break;
    // Check for end of line
        if(xx<xxold&&g>1)
        {
            i++;
            j = 0;
        }
        xarray[j] = xx;
        yarray[i] = yy;
        zarray[i][j] = zz;
        j++;
        xxold = xx;
        yyold = yy;
        zzold = zz;
    }
    *nrows = i + 1;
    *ncols = j;
    cout <<" number of rows = "<<  *nrows << "          number of lines = "<< *ncols <<
endl;
    // close file
    InFile.close();
}

```

Nebenprogramm findstep.cpp:

```

using namespace std;

void FindStep(int nstep[2000],double z[2000][2000],int nrows,int ncols, double
zdiffstep[2000], double *zdifflimit, double limit, int ndiff, int direction){
    // smoothed differentiation looking for maximum or minimum in derivative
    double zdiff, zdiffstepmean;
    int i,j,k;
    int nstepmean;
    for(i=0;i<nrows;i++){
        nstep[i]=0;
        zdiffstep[i]=0;
        for(j=ndiff; j<ncols-ndiff; j++){
            zdiff=0;
            for (k=0;k<ndiff;k++){
                zdiff=zdiff-z[i][j-k-1]+z[i][j+k+1];
            }
            if(zdiff*direction > zdiffstep[i]*direction){
                nstep[i]=j;
                zdiffstep[i]=zdiff;
            }
        }
        cout <<"number of line  " << i <<"  step at column number  " << nstep[i]
<<"  derivative "<< zdiffstep[i] << endl;
    }
    // mean value of step position and the corresponding derivative
    nstepmean = 0;
    zdiffstepmean = 0;
    for(i=0;i<nrows;i++){

```

```

        nstepmean = nstep[i] + nstepmean;
        zdiffstepmean = zdiffstep[i] + zdiffstepmean;
    }
    nstepmean = nstepmean / nrows;
    zdiffstepmean = zdiffstepmean / nrows;
    *zdiffflimit = zdiffstepmean*limit/100;
}

```

Nebenprogramm badlines.cpp:

```

using namespace std;

void BadLines(double zdiffstep[2000], double z[2000][2000], int nstep[2000], int
keep[2000], int nrows, int ncols, int *nrowsnew, int direction, double zdiffflim-
it){
    int i,j,ii;
    ii = 0;
    for(i=0;i<nrows;i++){
        if(zdiffstep[i]*direction > zdiffflimit * direction){
            for(j=0;j<ncols;j++){
                z[ii][j] = z[i][j];
            }
            nstep[ii] = nstep[i];
            keep[i]=1;
            zdiffstep[ii] = zdiffstep[i];
            ii=ii + 1;
        }
        else{
            keep[i] =0;
        }
    }
    *nrowsnew = ii;
    cout << "number of removed lines = " << nrows - *nrowsnew << endl;
}

void KnownBadLines(int keep[2000], double z[2000][2000], int nrows, int ncols){
    int i,ii,j;
    ii = 0;
    for(i=0;i<nrows;i++){
        {
            if(keep[i] > 0)
            {
                for(j=0;j<ncols;j++){
                    {
                        z[ii][j] = z[i][j];
                    }
                    ii=ii + 1;
                }
            }
            else;
        }
    }
}

```

Nebenprogramm minmax.cpp:

```

using namespace std;

void LookingForMinMax(int *nstepmean, double *zdiffstepmean, int nrowsnew, int
nstep[2000], double zdiffstep[2000], int keep[2000], int *ndistleft, int
*ndistright, int ncols, int nrows){
    int i;
    *nstepmean = 0;
    *zdiffstepmean = 0;
    for(i=0;i<nrowsnew;i++){
        // cout << i <<" " << nstep[i] <<" " << zdiffstep[i] << " " << keep[i] <<
endl;
        *nstepmean = nstep[i] + *nstepmean;
        *zdiffstepmean = zdiffstep[i] + *zdiffstepmean;
        if(nstep[i]< *ndistleft){
            *ndistleft = nstep[i];
        }
        if(ncols-nstep[i]< *ndistright){
            *ndistright = ncols - nstep[i];
        }
    }
}

```

```

    }
}
*nstepmean = *nstepmean / nrows;
*zdiffstepmean = *zdiffstepmean / nrows;
}

```

Nebenprogramm `writparams.cpp`:

```

using namespace std;

void WriteParams(int nstepmean, int ndistleft, int ndistright, double zdiffstep-
mean, double zdifflimit){
    cout << "mean position = " << nstepmean << endl;
    cout << "distance left = " << ndistleft << endl;
    cout << "distance right = " << ndistright << endl;
    cout << "mean value of max/minimum = " << zdiffstepmean << endl;
    cout << "cutoff = " << zdifflimit << endl;
}

```

Nebenprogramm `adjustlines.cpp`:

```

using namespace std;

void AdjustLines(double zadj[2000][2000], double xadj[2000], double z[2000][2000],
double x[2000], int nstep[2000], int ndistleft, int deltamax, int rowsnew, int
ncols){
    int i,j;
    for(i=0;i<rowsnew;i++){
        for(j=0;j<ncols-deltamax;j++){
            zadj[i][j]=z[i][j+nstep[i]-ndistleft];
        }
    }
    for(j=0;j<ncols-deltamax;j++){
        xadj[j]=x[j]-x[ndistleft];
    }
}

```

Nebenprogramm `writedatafile.cpp`:

```

using namespace std;

void WriteDataFile(string outfilename, char line1[121], char line2[121], char
line3[121], double xadj[2000], double y[2000], double zadj[2000][2000], int
ndistleft, int ndistright, int rowsnew){
    int i,j;
    ofstream OutFile(outfilename.c_str());
    // check for errors
    if (!OutFile){
        cout << "error opening file!\n";
        exit (1);
    }
    // write data
    OutFile << line1 << endl;
    OutFile << line2 << endl;
    OutFile << line3 << endl;
    for(i=0;i<rowsnew;i++){
        for(j=0;j<ndistleft+ndistright+1;j++){
            OutFile << xadj[j] << " " << y[i] << " " << zadj[i][j]<< endl;
        }
    }
}

```


Literaturverzeichnis

- [1] C. L. Kane und E. J. Mele, Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect, *Phys. Rev. Lett.* 95, 146802 (2005).
- [2] Y. Ando, Topological Insulator Materials, *J. Phys. Soc. Jap* 82, 102001 (2013).
- [3] A. Bansil, H. Lin und T. Das, Colloquium: Topological band theory, *Rev. Mod. Phys.* 88, 021004 (2016).
- [4] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, *Science* 318, 766-770 (2007).
- [5] M. Z. Hasan und C. L. Kane, Colloquium: Topological insulators, *Rev. Mod. Phys.* 82, 3045-3067 (2010).
- [6] L. Fu, C. L. Kane und E. J. Mele, Topological Insulators in Three Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* 98, 106803 (2007).
- [7] J. E. Moore und L. Balents, Topological invariants of time-reversal-invariant band structures, *Phys. Rev. B* 75, 121306 (2007).
- [8] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava und M. Z. Hasan, A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase, *Nature* 452, 970-975 (2008).
- [9] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang und S.-C. Zhang, Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface, *Nat. Phys.* 5, 438-442 (2009).
- [10] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava und M. Z. Hasan, Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface, *Nat. Phys.* 5, 439-402 (2009).
- [11] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain und Z.-X. Shen, Experimental Realization of a Three-Dimensional Topological Insulator, Bi₂Te₃, *Science* 325, 178-181 (2009).
- [12] D. Castelvecchi, The shape of things to come, *Nature* 457, 272ff. (2017).
- [13] M. Mitchell Waldrop, More than Moore, *Nature* 530, 144-147 (2016).
- [14] G. E. Moore, Progress in Digital Integrated Electronics, *IEDM Tech. Digest*, 11-13 (1975).
- [15] S. Bauer, Transport auf mikroskopischer Skala, Masterarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2013.
- [16] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber und E. Weibel, Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy, *Phys. Rev. Lett.* 49, 157-161 (1982).

- [17] J. G. Simmons, Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film, *J. Appl. Phys.* 34, 1739-1803 (1963).
- [18] J. Tersoff und D. R. Hamann, Theory and Application for Scanning Tunneling Microscopy, *Phys. Rev. Lett* 50, 25, 1998-2001 (1983).
- [19] J. Bardeen, Tunneling from a multi particle point of view, *Phys. Rev. Lett.* 6, 2, 57-59 (1961).
- [20] J. Tersoff und D. R. Hamann, Theory of scanning tunneling microscopy, *Phys. Rev. B* 42, 2, 805-813 (1985).
- [21] R. M. Feenstra, J. A. Stroscio und A. P. Fein, Tunneling Spectroscopy of the Si(111)2×1 Surface, *Surf. Sci.* 181, 295-309 (1987).
- [22] C. J. Chen, Theory of Scanning Tunneling spectroscopy, *J. Vac. Sci. Technol.* 6, 2, 319-322 (1988).
- [23] C. J. Chen, Tunneling matrix elements in three-dimensional space: The derivative rule and the sum rule, *Phys. Rev. B* 42, 14, 8841-8857 (1990).
- [24] ASTM E 2382-04, Guide to Scanner and Tip Related Artifacts in Scanning Tunneling Microscopy and Atomic Force Microscopy, ASTM International, 2004.
- [25] B. Voigtländer, Scanning Probe Microscopy, Springer, 2015, 115-121.
- [26] P. Muralt und D. W. Pohl, Scanning tunneling potentiometry, *Appl. Phys. Lett.* 48, 514-516 (1986).
- [27] C. A. Bobisch und R. Möller, Electron Transport at Surfaces and Interfaces, *CHIMIA* 66, 23-30 (2012).
- [28] A. Bannani, C. A. Bobisch und R. Möller, Local potentiometry using a multiprobe scanning tunneling microscope, *Rev. Sci. Instr.* 79, 083704 (2008).
- [29] P. Drude, Zur Elektronentheorie der Metalle, *Ann. Phys.* 1, 575 (1900).
- [30] H. Ibach und H. Lüth, Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen, 7. Aufl., Springer, 2009, 241-256, 440 ff.
- [31] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, 10. Druck, Cambridge University Press, Cambridge 2013, 37-43, 51-57, 65-74.
- [32] J. Homoth, Das elektrochemische Potential auf der atomaren Skala, Dissertation, Georg-August-Universität, Göttingen 2008, 21 f.
- [33] C. R. Leavens und G. C. Aers, Vacuum Tunneling Thermopower: Normal Metal Electrodes, *Sol. State Com* 61, 289-295 (1987).
- [34] J. A. Støvneng und P. Lipavský, Thermopower in scanning-tunneling-microscope experiments, *Phys. Rev. B* 42, 14, 9214-9216 (1990).
- [35] D. Hoffmann, J. Seifritz, B. Weyers und R. Möller, Thermovoltage in scanning tunneling microscopy, *J. Electron Spectr.* 109, 117-125 (2000).

- [36] J. P. Pelz und R. H. Koch, Tip-related artifacts in scanning tunneling potentiometry, *Phys. Rev. B* 84, 1212-1215 (1990).
- [37] S. Bauer und C. A. Bobisch, Nanoscale electron transport at the surface of a topological insulator, *Nat. Com.* 7, 11381 (2016).
- [38] I. Miccoli, F. Edler, H. Pfürn und C. Tegenkamp, The 100th anniversary of the four-point probe technique: the role of probe geometries in isotropic and anisotropic systems, *J. Phys.: Condens. Matter* 27, 223201 (2015).
- [39] P. Jaschinsky, J. Wensorra, M. I. Lepsa, J. Mysliveček und B. Voigtländer, Nanoscale charge transport measurements using a double-tip scanning tunneling microscope, *J. Appl. Phys.* 104, 094307 (2008).
- [40] L. B. Valdes, Resistivity Measurements on Germanium for Transistors, *Proc. IRE* 42, 420-427 (1954).
- [41] S. Just, M. Blab, S. Korte, V. Cherepanov, H. Soltner und B. Voigtländer, Surface and Step Conductivities on Si(111) Surfaces, *Phys. Rev. Lett.* 115, 066801 (2015).
- [42] T. Kanagawa, R. Hobara, I. Matsuda, T. Tanikawa, A. Natori und S. Hasegawa, Anisotropy in Conductance of a Quasi-One-Dimensional Metallic Surface State Measured by a Square Micro-Four-Point Probe Method, *Phys. Rev. Lett.* 91, 3, 036805 (2003).
- [43] M. von Ardenne, Das Elektronen-Rastermikroskop, *Z. Phys.* 19, 553-572 (1938).
- [44] H. Lüth, *Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films*, 5. Aufl., Springer, 2010, 88-92, 108-114, 196-204.
- [45] C. Davisson und L. H. Germer, Diffraction of electrons by a crystal of Nickel, *Phys. Rev.* 30, 705-740 (1927).
- [46] M. P. Seah und W. A. Dench, Quantitative Electron Spectroscopy of Surfaces: A Standard Data Base for Electron Inelastic Mean Free Paths in Solids, *Surf. Interf. Anal.*, 2-11 (1979).
- [47] C. A. Bobisch, *Mikroskopie mit ballistischen Elektronen*, Dissertation, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2007, 39-64.
- [48] A. Banani, *Ladungstransport in dünnen metallischen Filmen*, Dissertation, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2007, 23-37.
- [49] P. Zahl, T. Wagner, R. Möller und Andreas Klust, Open source scanning probe microscopy control software package GXSM, *J. Vac. Sci. Technol. B* 28, C4E39 (2010).
- [50] I. Horcas, R. Fernández, J. M. Gómez-Rodríguez, J. Colchero, J. Gómez-Herrero und A. M. Baro, WSxM: A software for scanning probe microscopy and a tool for nanotechnology, *Rev. Sci. Instrum.* 78, 013705 (2007).
- [51] R. S. Becker, J. A. Golovchenko, E. G. McRae und B. S. Swartzentruber,

- Tunneling Images of Atomic Steps on the Si(111)7×7 Surface, Phys. Rev. Lett. 55, 2028-2031 (1985).
- [52] D. D. Chambliss, R. J. Wilson und S. Chiang, Nucleation of Ordered Ni Island Arrays on Au(111) by Surface-Lattice Dislocations, Phys. Rev. Lett. 66, 1721-1724 (1991).
- [53] R. Kazinczi, E. Szöcs¹, E.Kálmán und P. Nagy, Novel methods for preparing EC STM tips, Appl. Phys. A 66, 535-538 (1998).
- [54] B. Ren, G. Picardi und B. Pettinger, Preparation of gold tips suitable for tip-enhanced Raman spectroscopy and light emission by electrochemical etching, Rev. Sci. Instrum. 75, 837-841 (2004).
- [55] G. K. Wehner, Sputtering of Metal Single Crystals by Ion Bombardment, J. Appl. Phys. 26, 1056 f. (1955).
- [56] E. Bauer, Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen. I, Z. Kristallogr. 110, 372-394 (1958).
- [57] O. Madelung (Hrsg.), Landolt-Börnstein - Neue Serie Band 5b, Springer 1992, 230 f., 239 ff.
- [58] Y. Li, G. Wang, X.-G. Zhu, M.-H. Liu, C. Ye, X. Chen, Y.-Y. Wang, K. He, L.-L. Wang, X.-C. Ma, H.-J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, X.-C. Xie, Y. Liu, X.-L. Qi, J.-F. Jia, S.-C. Zhang und Q.-K. Xue, Intrinsic Topological Insulator Bi₂Te₃ Thin Films on Si and Their Thickness Limit, Adv. Mat. 22, 4002-4007 (2010).
- [59] P. Kury, R. Hild, D. Thien, H.-L. Günter, F.-J. Meyer zu Heringdorf und M. Horn-von Hoegen, Compact and transferable threefold evaporator for molecular beam epitaxy in ultrahigh vacuum, Rev. Sci. Instrum. 76, 083906 (2005).
- [60] A. Band und J. A. Stroscio, A closed loop controller for electron-beam evaporators, Rev. Sci. Instr. 67, 2366-2369 (1996).
- [61] K. Bartsch, Untersuchung dünner Bi- und Bi₂Te₃-Schichten, Bachelorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2016, 13-27.
- [62] J. Weiß und M. Winkenbach (Leit.), Der Brockhaus. Naturwissenschaft und Technik, Bibliographisches Institut & F. A. Brockhaus AG, Spektrum Akademischer Verlag GmbH, 2003.
- [63] D. R. Lide (Hrsg.), Handbook of Chemistry and Physics, 90. Aufl., CRC Press, 2009, 4-5 bis 4-31, 4-46, 4-81 f, 4-88, 12-15 bis 12-18, 12-207.
- [64] Ph. Hofmann, The surfaces of bismuth: Structural and electronic properties, Progr. Surf. Sci. 82, 191-245 (2006).
- [65] N. Osakabe, Y. Tanishiro, K. Yagi und G. Honjo, Direct observation of the phase transition between the (7×7) and (1×1) structures of clean (111) silicon surfaces, Surf. Sci. 109, 353-366 (1981).
- [66] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber und E. Weibel, 7×7 Reconstruction on Si(111) Resolved in Real Space, Phys. Rev. Lett. 50, 120-123 (1983).

- [67] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi und M. Takahash, Structure analysis of Si(111)-7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction, *Surf. Sci.* 164, 367-392 (1985).
- [68] K. J. Wan, T. Guo, W. K. Ford und J. C. Hermanson, Initial growth of Bi films on a Si(111) substrate: Two phases of $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ energy-electron-diffraction pattern and their geometric structures, *Phys. Rev. B* 44, 3471-3474 (1991).
- [69] G. Zhang, H. Qin, J. Teng, J. Guo, Q. Guo, X. Dai, Z. Fang und K. Wua, Quintuple-layer epitaxy of thin films of topological insulator Bi₂Se₃, *Appl. Phys. Lett.* 95, 053114 (2009).
- [70] J. R. Wiese und L. Muldower, Lattice Constants of Bi₂Te₃ Bi₂Se₃ Solid Solution Alloys, *J. Phys, Chem Solids* 15, 13-16 (1960).
- [71] G. Zhang , H. Qin , J. Chen , X. He , L. Lu , Y. Li und K. Wu, Growth of Topological Insulator Bi₂Se₃ Thin Films on SrTiO₃ with Large Tunability in Chemical Potential, *Adv. Funct. Mater.* 21, 2351-2355 (2011).
- [72] M. Vyshnepolsky, C. Klein, F. Klasing, A. Hanisch-Blicharski und M. Horn-von Hoegen, Epitaxial growth of the topological insulator Bi₂Se₃ on Si(111): Growth mode, lattice parameter, and strain state, *Appl. Phys. Lett.* 103, 111909 (2013).
- [73] J. Krumrain, G. Mussler, S. Borisova, T. Stoica, L. Plucinski, C. M. Schneider und D. Grützmacher, MBE growth optimization of topological insulator Bi₂Te₃ films, *J. Cryst. Growth* 324, 115-118 (2011).
- [74] N. Peranio, M. Winkler , M. Dürrschnabel , J. König und O. Eibl, Assessing Antisite Defect and Impurity Concentrations in Bi₂Te₃ Based Thin Films by High-Accuracy Chemical Analysis, *Adv. Funt. Mat.* 23, 4969-4979 (2013).
- [75] L. Fu und C. L. Kane, Topological insulators with inversion symmetry, *Phys. Rev. B* 76, 045302 (2007).
- [76] R. R. Biswas und A. V. Balatsky, Scattering from surface step edges in strong topological insulators, *Phys. Rev. B* 83, 075439 (2011).
- [77] S. Urazhdin, D. Bilc, S. D. Mahanti, S. H. Tessmer, T. Kyratsi und M. G. Kanatzidis, Surface effects in layered semiconductors Bi₂Se₃ and Bi₂Te₃, *Phys. Rev. B* 69, 085313 (2004).
- [78] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A.V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava und M. Z. Hasan, Observation of Time-Reversal-Protected Single-Dirac-Cone Topological-Insulator States in Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃, *Phys. Rev. Lett.* 103, 146401 (2009).
- [79] D. L. Greenaway und G. Harbeke, Band Structure of Bismuth Telluride, Bismuth Selenide and Their Respective Alloys, *J. Phys. Chem. Solids* 26,

- 1585-1604 (1965).
- [80] Y. Okada, W. Zhou, D. Walkup, C. Dhital, S. D. Wilson und V. Madhavan, Ripple-modulated electronic structure of a 3D topological insulator, *Nat. Com.* 3, 1158 (2012).
 - [81] L. Wu, M. Brahlek, R. Valdés Aguilar, A. V. Stier, C. M. Morris, Y. Lubashevsky, L. S. Bilbro, N. Bansal, S. Oh und N. P. Armitage, A sudden collapse in the transport lifetime across the topological phase transition in $(\text{Bi}(1-x)\text{In}_x)_2\text{Se}_3$, *Nat. Phys.* 9, 410-414 (2013).
 - [82] K. Kuroda, M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E. E. Krasovskii, E.V. Chulkov, H. Iwasawa, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame und M. Taniguchi, Hexagonally Deformed Fermi Surface of the 3D Topological Insulator Bi_2Se_3 , *Phys. Rev. Lett.* 105, 076802 (2010).
 - [83] W.-C. Lee, C. Wu, D. P. Arovas und S.-C. Zhang, Quasiparticle interference on the surface of the topological insulator Bi_2Te_3 , *Phys. Rev. B* 80, 245439 (2009).
 - [84] M. Bianchi, D. Guan, S. Bao, J. Mi, B. Brummerstedt Iversen, P. D. C. King und P. Hofmann, Coexistence of the topological state and a two-dimensional electron gas on the surface of Bi_2Se_3 , *Nat. Com.* 1, 128 (2010).
 - [85] C. Chen, S. He, H. Weng, W. Zhang, L. Zhao, H. Liu, X. Jia, D. Mou, S. Liu, J. He, Y. Peng, Y. Feng, Z. Xie, G. Liu, X. Dong, J. Zhang, X. Wang, Q. Peng, Z. Wang, S. Zhang, F. Yang, C. Chen, Z. Xub, X. Dai, Z. Fang und X. J. Zhou, Robustness of topological order and formation quantum well states in topological insulators exposed to ambient environment, *Proc. Nat. Acad. Sci.* 109, 3694-3698 (2012).
 - [86] H. Steinberg, D. R. Gardner, Y. S. Lee, and P. Jarillo-Herrero, Surface State Transport and Ambipolar Electric Field Effect in Bi_2Se_3 Nanodevices, *Nano Lett.* 10, 5032-5036 (2010).
 - [87] K. Hoefer, C. Becker, D. Rata, J. Swanson, P. Thalmeier und L. H. Tjenga, Intrinsic conduction through topological surface states insulating Bi_2Te_3 epitaxial thin films, *Proc. Nat. Acad. Sci.* 111, 14979-14984 (2014).
 - [88] N. Bansal, Y. S. Kim, M. Brahlek, E. Edrey und S. Oh, Thickness-Independent Transport Channels in Topological Insulator Bi_2Se_3 Thin Films, *Phys. Rev. Lett.* 109, 116804 (2012).
 - [89] L. He, F. Xiu, X. Yu, M. Teague, J. Wanjun, Y. Fan, X. Kou, M. Lang, Y. Wang, G. Huang, N.-C. Yeh und K. L. Wang, Surface-Dominated Conduction in a 6 nm thick Bi_2Se_3 Thin Film, *Nano Lett.* 12, 1486-1490 (2012).
 - [90] L. He, F. Xiu, Y. Wang, A. V. Fedorov, G. Huang, X. Kou, M. Lang, W. P. Beyermann, J. Zou und K. L. Wang, Epitaxial growth of Bi_2Se_3

- topological insulator thin films on Si(111), J. Appl. Phys. 109, 103702 (2011).
- [91] M. Liu, C.-Z. Chang, Z. Zhang, Y. Zhang, W. Ruan, K. He, L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, S.-C. Zhang, Q.-K. Xue, X. Ma und Y. Wang, Electron interaction-driven insulating ground state in Bi₂Se₃ topological insulators in the two-dimensional limit, Phys. Rev. B 83, 165440 (2011).
- [92] J. Y. Park, G.-H. Lee, J. Jo, A. K. Cheng, H. Yoon, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Kim, P. Kim und G.-C. Yi, Molecular beam epitaxial growth and electronic transport properties of high quality topological insulator Bi₂Se₃ thin films on hexagonal boron nitride, 2D Mater. 3, 035029 (2016).
- [93] M. Brahlek, Y. S. Kim, N. Bansal, E. Edrey und S. Oh, Surface versus bulk state in topological insulator Bi₂Se₃ under environmental disorder, Appl. Phys. Lett. 99, 012109 (2011).
- [94] D. Kim, S. Cho, N. P. Butch, P. Syers, K. Kirshenbaum, S. Adam, J. Paglione und M. S. Fuhrer, Surface conduction of topological Dirac electrons in bulk insulating Bi₂Se₃, Nat. Phys. 8, 459-463 (2012).
- [95] J. G. Checkelsky, Y. S. Hor, R. J. Cava, and N. P. Ong, Bulk Band Gap and Surface State Conduction Observed in Voltage-Tuned Crystals of the Topological Insulator Bi₂Se₃, Phys. Rev. Lett. 106, 196801 (2011).
- [96] L. Fang, Y. Jia, D. J. Miller, M. L. Latimer, Z. L. Xiao, U. Welp, G. W. Crabtree und W.-K. Kwok, Catalyst-Free Growth of Millimeter-Long Topological Insulator Bi₂Se₃ Nanoribbons and the Observation of the π -Berry Phase, Nano Lett. 12, 6164-6169 (2012).
- [97] K. Wang, Y. Liu, Weiyi Wang, N. Meyer, L. H. Bao, L. He, M. R. Lang, Z. G. Chen, X. Y. Che, K. Post, J. Zou, D. N. Basov, K. L. Wang und F. Xiu, High-quality Bi₂Te₃ thin films grown on mica substrates for potential optoelectronic applications, Appl. Phys. Lett. 103, 031605 (2013).
- [98] Y. Wang, F. Xiu, L. Cheng, L. He, M. Lang, J. Tang, X. Kou, X. Yu, X. Jiang, Z. Chen, J. Zou und K. L. Wang, Gate-Controlled Surface Conduction in Na-Doped Bi₂Te₃ Topological Insulator Nanoplates, Nano Lett. 12, 1170-1175 (2012).
- [99] T. Chen, Q. Chen, K. Schouteden, W. Huang, X. Wang, Z. Li, F. Miao, X. Wang, Z. Li¹, B. Zhao, S. Li, F. Song, J. Wang, B. Wang, C. van Haesendonck und G. Wang, Topological transport and atomic tunnelling-clustering dynamics for aged Cu-doped Bi₂Te₃ crystals, Nat. Com. 5, 5022 (2014).
- [100] D.-X. Qu, Y. S. Hor, J. Xiong, R. J. Cava und N. P. Ong, Quantum Oscillations and Hall Anomaly of Surface States in the Topological Insulator Bi₂Te₃, Science 329, 821-824 (2010).
- [101] S. Barua, K. P. Rajeev und A. K. Gupta, Evidence for topological surface states in metallic single crystals of Bi₂Te₃, J. Phys.: Condens. Matter 27,

- 015601 (2015).
- [102] M. Tian, W. Ning, Z. Qu, H. Du, J. Wang und Y. Zhang, Dual evidence of surface Dirac states in thin cylindrical topological insulator Bi₂Te₃ nanowires, *Scient. Rep.* 3, 1212 (2012).
 - [103] B. Hamdou, J. Gooth, A. Dorn, E. Pippel und K. Nielsch, Surface state dominated transport in topological insulator Bi₂Te₃ nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 103, 193107 (2013).
 - [104] F. Xiu, L. He, Y. Wang, L. Cheng, L.-T. Chang, M. Lang, G. Huang¹ X. Kou, Y. Zhou, X. Jiang, Z. Chen, J. Zou, A. Shailos und K. L. Wang, Manipulating surface states in topological insulator nanoribbons, *Nat. Nanotechn.* 6, 216-221 (2011).
 - [105] S. Just, H. Soltner, S. Korte, V. Cherepanov und B. Voigtländer, Surface conductivity of Si(100) and Ge(100) surfaces determined from four-point transport measurements using an analytical N-layer conductance model, *Phys. Rev. B* 95, 075310 (2017).
 - [106] B. V. C. Martins, M. Smeu, L. Livadaru, H. Guo und R. A. Wolkow, Conductivity of Si(111)-(7 × 7): The Role of a Single Atomic Step, *Phys. Rev. Lett.* 112, 246802 (2014).
 - [107] F. Lüpke, S. Just, G. Bihlmayer, M. Lanius, M. Luysberg, J. Doležal, E. Neumann, V. Cherepanov, I. Ošťádal, G. Mussler, D. Grützmacher und B. Voigtländer, Chalcogenide-based van der Waals epitaxy: Interface conductivity of tellurium on Si(111), *Phys. Rev. B* 96, 035301 (2017).
 - [108] J. Homoth, M. Wenderoth, T. Druga, L. Winking, R. G. Ulbrich, C. A. Bobisch, B. Weyers, A. Bannani, E. Zubkov, A. M. Bernhart, M. R. Kaspers und R. Möller, Electronic Transport on the Nanoscale: Ballistic Transmission and Ohm's Law, *Nano Lett.* 9, 1588-1592 (2009).
 - [109] I. Matsuda, M. Ueno, T. Hirahara, R. Hobara, H. Morikawa, C. Liu und S. Hasegawa, *Phys. Rev. Lett.* 93, 236801 (2004): Electrical Resistance of a Monatomic Step on a Crystal Surface.
 - [110] S.-H. Ji, J. B. Hannon, R. M. Tromp, V. Perebeinos, J. Tersoff und F. M. Ross, Atomic-scale transport in epitaxial graphene, *Nat. Mat.* 11, 114-119 (2012).
 - [111] K. W. Clark, X.-G. Zhang, I. V. Vlassiouk, G. He, R. M. Feenstra und A.-P. Li, Spatially Resolved Mapping of Electrical Conductivity across Individual Domain (Grain) Boundaries in Graphene, *ACS Nano* 7, 7959-7966 (2013).
 - [112] G. Jnawali, C. Klein, Th. Wagner, H. Hattab, P. Zahl, D. P. Acharya, P. Sutter, A. Lorke und M. Horn-von Hoegen, Manipulation of Electronic Transport in the Bi(111) Surface State, *Phys. Rev. Lett.* 108, 266804 (2012).
 - [113] T. Hirahara, I. Matsuda, , S. Yamazaki, N. Miyata , S. Hasegawa und T. Nagao, Large surface-state conductivity in ultrathin Bi films, *Appl.*

- Phys. Lett. 91, 202106 (2007).
- [114] F. Lüpke, M. Eschbach, T. Heider, M. Lanius, P. Schüffegen, D. Rosenbach, N. von den Driesch, V. Cherepanov, G. Mussler, L. Plucinski, D. Grützmacher, C. M. Schneider und B. Voigtländer, Electrical resistance of individual defects at a topological insulator surface, Nat. Com. 8, 15704 (2017).
- [115] F. Ortmann, S. Roche und S. O. Valenzuela (Hrsg.), Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives, Wiley VCH, 2015, 207 f., 307-311.
- [116] D. Culcer, E. H. Hwang, T. D. Stanescu und S. D. Sarma, Two-dimensional surface charge transport in topological insulators, Phys. Rev. B 82, 155457 (2010).
- [117] H. K. Pal, V. I. Yudson und D. L. Maslov, Effect of electron-electron interaction on surface transport in the Bi₂Te₃ family of three-dimensional topological insulators, Phys. Rev. B 85, 085439 (2012).
- [118] S. Giraud, A. Kundu und R. Egger, Electron-phonon scattering in topological insulator thin films, Phys. Rev. B 85, 035441 (2012).
- [119] C. Mann, D. West, I. Miotkowski, Y. P. Chen, S. Zhang und C.-K. Shih, Mapping the 3D surface potential in Bi₂Se₃, Nat. Com 4, 2277 (2013).
- [120] T. Zhang, P. Cheng, X. Chen, J.-F. Jia, X. Ma, K. He, L. Wang, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, X. Xie, und Q.-K. Xue, Experimental Demonstration of Topological Surface States Protected by Time-Reversal Symmetry, Phys. Rev. Lett. 103, 266803 (2009).
- [121] J. Wang, A. M. DaSilva, C.-Z. Chang, K. He, J. K. Jain, N. Samarth, X.-C. Ma, Q.-K. Xue und M. H. W. Chan, Evidence for electron-electron interaction in topological insulator thin films, Phys. Rev. B 83, 245438 (2011).
- [122] A. Roy, S. Guchhait, S. Sonde, R. Dey, T. Pramanik, A. Rai, H. C. P. Movva, L. Colombo und S. K. Banerjee, Two-dimensional weak anti-localization in Bi₂Te₃ thin film grown on Si(111)-(7×7) surface by molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett. 102, 163118 (2013).
- [123] M. V. Costache, I. Neumann, J. F. Sierra, V. Marinova, M. M. Gospodinov, S. Roche und S. O. Valenzuela, Fingerprints of Inelastic Transport at the Surface of the Topological Insulator Bi₂Se₃: Role of Electron-Phonon Coupling, Phys. Rev. Lett. 112, 086601 (2014).
- [124] A. Tamtögl, P. Kraus, N. Avidor, M. Bremholm, E. M. J. Hedegaard, B. B. Iversen, M. Bianchi, P. Hofmann, J. Ellis, W. Allison, G. Benedek und W. E. Ernst, Electron-phonon coupling and surface Debye temperature of Bi₂Te₃(111) from helium atom scattering, Phys. Rev. B 95, 195401 (2017).
- [125] O. Madelung, Semiconductors: Data Handbook, 3. Auflage, Springer, 2004, 628-632.
- [126] S. Kim, M. Ye, K. Kuroda, Y. Yamada, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, K.

- Miyamoto, M. Nakatake, T. Okuda, Y. Ueda, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi und A. Kimura, Surface Scattering via Bulk Continuum States in the 3D Topological Insulator Bi₂Se₃, *Phys. Rev. Lett.* 107, 056803 (2011).
- [127] P. Sessi, M. M. Otrokov, T. Bathon, M. G. Vergniory, S. S. Tsirkin, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov und M. Bode, Visualizing spin-dependent bulk scattering and breakdown of the linear dispersion relation in Bi₂Te₃, *Phys. Rev. B* 88, 161407 (2013).
- [128] J. Wang, W. Li, P. Cheng, C. Song, T. Zhang, P. Deng, X. Chen, X. Ma, K. He, J.-F. Jia, Q.-K. Xue und B.-F. Zhu, Power-law decay of standing waves on the surface of topological insulators, *Phys. Rev. B* 84, 235447 (2011).
- [129] W. Jing und Z. Bang-Fen, Elastic scattering of surface states on three-dimensional topological insulators, *Chin. Phys. B* 22, 067301 (2013).
- [130] M. F. Crommie, C. P. Lutz und D. M. Eigler, Imaging standing waves in a two-dimensional electron gas, *Nature* 363, 524-527 (1993).
- [131] M. Blab, Ladungstransportmessungen an Si(111) Oberflächen mit einem Multispitzen-Rastertunnelmikroskop, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Jülich 2014, 93-97.
- [132] S. Bauer, A. M. Bernhart, C. A. Bobisch, Electron transport in Bi₂Se₃ ultra thin films, *Appl. Surf. Sci.* 432, 140-146 (2018).
- [133] A. A. Taskin, S. Sasaki, K. Segawa und Y. Ando, Manifestation of Topological Protection in Transport Properties of Epitaxial Bi₂Se₃ Thin Films, *Phys. Rev. Lett.* 109, 066803 (2012).
- [134] R. Möller, Thermovoltage in scanning tunneling microscopy, in: R. Wiesendager (Hrsg.), *Scanning Probe Microscopy - Analytical Methods*, Springer, 1998, 49-69.
- [135] D. Hoffmann, J. Y. Grand, R. Möller, A. Rettenberger und K. Lauger, Thermovoltage across a vacuum barrier investigated by scanning tunneling microscopy: Imaging of standing electron waves, *Phys. Rev. N* 52, 13796-13799 (1995).
- [136] A. Schneider, M. Wenderoth, K. J. Engel, M. A. Rosentreter, A. J. Heinrich und R. G. Ulbrich, Local electronic structure at steps on Au(111) investigated by the thermovoltage in scanning tunneling microscopy, *Appl. Phys. A* 66, 161-165 (1998).
- [137] T. Zhang, N. Levy, J. Ha, Y. Kuk und J. A. Stroscio, Scanning tunneling microscopy of gate tunable topological insulator Bi₂Se₃ thin films, *Phys. Rev. B* 87, 115410 (2013).
- [138] N. P. Butch, K. Kirshenbaum, P. Syers, A. B. Sushkov, G. S. Jenkins, H. D. Drew und J. Paglione, Strong surface scattering in ultrahigh-mobility Bi₂Se₃ topological insulator crystals, *Phys. Rev. B* 81, 241301.
- [139] P. Ghaemi, Roger S. K. Mong und J. E. Moore, In-Plane Transport and Enhanced Thermoelectric Performance in Thin Films of the

- Topological Insulators Bi₂Te₃ and Bi₂Se₃, Phys. Rev. Lett. 105, 166603 (2010).
- [140] S. Bauer und C. A. Bobisch, Electron transport in stepped Bi₂Se₃ thin films, J. Phys.: Condens Matter 29, 334002 (2017).
- [141] Y. Liu, Y. Y. Li, S. Rajput, D. Gilks, L. Lari, P. L. Galindo, M. Weinert, V. K. Lazarov und L. Li, Tuning Dirac states by strain in the topological insulator Bi₂Se₃, Nat. Phys. 10, 294-299 (2014).
- [142] P. Graf, Transportmessung an topologischen Isolatoren und perkolierenden Silbernetzwerken, Masterarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2014, 42 ff., 52-57, 64-68.
- [143] P. Graf, S. Bauer, R. Moeller und C. A. Bobisch, Tuning the microscopic and macroscopic conductivity of Bi₂Se₃ thin films by bismuth ad-islands, vorbereitetes Manuskript.
- [144] A. Eich, M. Michiardi, G. Bihlmayer, X.-G. Zhu, J.-L. Mi, Bo B. Iversen, R. Wiesendanger, Ph. Hofmann, A. A. Khajetoorians und J. Wiebe, Intra- and interband electron scattering in a hybrid topological insulator: Bismuth bilayer on Bi₂Se₃, Phys. Rev. B 90, 155414 (2014).
- [145] G. Jnawali, Th. Wagner, H. Hattab, R. Möller, A. Lorke und M. Horn-von Hoegen, Two-Dimensional Electron Transport and Scattering in Bi(111) Surface States, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 8, 27-31 (2010).
- [146] M. Chen, J.-P. Peng, H.-M. Zhang, L.-L. Wang, K. H., X.-C. Ma und Q.-K. Xue, Molecular beam epitaxy of bilayer Bi(111) films on topological insulator Bi₂Te₃: A scanning tunneling microscopy study, Appl. Phys. Lett. 101, 081603 (2012).
- [147] T. Hirahara, G. Bihlmayer, Y. Sakamoto, M. Yamada, H. Miyazaki, S. Kimura, S. Blügel und S. Hasegawa, Interfacing 2D and 3D Topological Insulators: Bi(111) Bilayer on Bi₂Te₃, Phys. Rev. Lett. 107, 166801 (2011).
- [148] F. Yang, L. Miao, Z. F. Wang, M.-Y. Yao, F. Zhu, Y. R. Song, M.-X. Wang, J.-P. Xu, A. V. Fedorov, Z. Sun, G. B. Zhang, C. Liu, F. Liu, D. Qian, C. L. Gao und J.-F. Jia, Spatial and Energy Distribution of Topological Edge States in Single Bi(111) Bilayer, Phys. Rev. Lett. 109, 016801 (2012).
- [149] M. Soleimani, Präparation und strukturelle Analyse dünner Bi₂Te₃-Proben, Masterarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2017, 51-68.
- [150] S. Hoepken, Elektrischer Transport in Bi₂Te₃ auf mikroskopischer Skala, Masterarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2017, 40-70.
- [151] S. Borisova, J. Kampmeier, M. Luysberg, G. Mussler und D. Grützmacher, Domain formation due to surface steps in topological insulator Bi₂Te₃ thin films grown on Si(111) by molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett. 103, 081902 (2013).

- [152] P. Ngabonziza, M. P. Stehno, H. Myoren, V. A. Neumann, G. Koster und A. Brinkman, Gate-Tunable Transport Properties of In Situ Capped Bi₂Te₃ Topological Insulator Thin Films, *Adv. Electron. Mater.* 2, 1600157 (2016).
- [153] Q. Liu, C.-X. Liu, C. Xu, X.-L. Qi und S.-C. Zhang, Magnetic Impurities on the Surface of a Topological Insulator, *Phys. Rev. Lett.* 102, 156603 (2009).
- [154] M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Varykhalov, A. Volykhov, L. V. Yashina und O. Rader, Intact Dirac cone of Bi₂Te₃ covered with a monolayer Fe, *Phys. Status Solidi RRL* 7, 139-141 (2013).
- [155] L. R. Shelford, T. Hesjedal, L. Collins-McIntyre, S. S. Dhesi, F. Maccherozzi, und G. van der Laan, Electronic structure of Fe and Co magnetic adatoms on Bi₂Te₃ surfaces, *Phys. Rev. B* 86, 081304 (2012).
- [156] M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Varykhalov, A. Volykhov, L.V. Yashina und O. Rader, Tolerance of Topological Surface States towards Magnetic Moments: Fe on Bi₂Se₃, *Phys. Rev. Lett.* 108, 256810 (2012).
- [157] D. Haneman, Comparison of Structures of Surfaces Prepared in High Vacuum by Cleaving and by Ion Bombardment and Annealing, *Phys. Rev.* 119, 563-566 (1960).
- [158] P. M. Coelho, G. A. S. Ribeiro, A. Malachias, V. L. Pimentel, W. S. Silva, D. D. Reis, M. S. C. Mazzoni und R. Magalhães-Paniago, Temperature-Induced Coexistence of a Conducting Bilayer and the Bulk-Terminated Surface of the Topological Insulator Bi₂Te₃, *Nano Lett.* 13, 4517-4521 (2013).
- [159] K. Schouteden, K. Govaerts, J. Debehets, U. Thupakul a, T. Chen, Z. Li, A. Netsou, F. Song, D. Lamoen, C. Van Haesendonck, B. Partoens und K. Park, Annealing-Induced Bi Bilayer on Bi₂Te₃ Investigated via Quasi-Particle-Interference Mapping, *ACS Nano* 10, 8778-8787 (2016).
- [160] H. Steiner, V. Volobuev, O. Caha, G. Bauer, G. Springholz und V. Holy, Structure and composition of bismuth telluride topological insulators grown by molecular beam epitaxy, *J. Appl. Crystall.* 47, 1889-1900 (2014).
- [161] X.-G. Zhu, Y. Zhang, W. Feng, B.-K. Yuan, Q. Liu, R.-Z. Qiu, D.-H. Xie, S.-Y. Tan, Y. Duan, Y. Fang, W. Zhang und X.-C. Lai, Electronic structures of topological insulator Bi₂Te₃ surfaces with non-conventional terminations, *New. J. Phys.* 18, 093015 (2016).
- [162] J. Seifritz, Th. Wagner, B. Weyers und R. Möller, Analysis of a SeCl₄-graphite intercalate surface by thermovoltage scanning tunneling microscopy, *Appl. Phys. Lett.* 94, 113112 (2009).
- [163] J.-Y. Grand, Laser Induced Effects in Scanning Tunneling Microscopy,

- Dissertation, Universität Konstanz, Konstanz 1996, 82-90.
- [164] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov und A. K. Geim, The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* 81, 109-162 (2009).
- [165] N. Sato, S. Takeda, T. Nagao und S. Hasegawa, Electron standing waves on the Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag surface, *Phys. Rev. B* 59, 2035-2039 (1999).
- [166] C. R. Ast und H. Höchst, Fermi Surface of Bi(111) Measured by Photoemission Spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.* 87, 177602 (2001).
- [167] A. Kimura, E. E. Krasovskii, R. Nishimura, K. Miyamoto, T. Kadono, K. Kanomaru, E. V. Chulkov, G. Bihlmayer, K. Shimada, H. Namatame und M. Taniguchi, Strong Rashba-Type Spin Polarization of the Photocurrent from Bulk Continuum States: Experiment and Theory for Bi(111), *Phys. Rev. Lett.* 105, 076804 (2010).
- [168] M. C. Cottin, C. A. Bobisch, J. Schaffert, G. Jnawali, G. Bihlmayer und R. Möller, Interplay between Forward and Backward Scattering of Spin-Orbit Split Surface States of Bi(111), *Nano Lett.* 13, 2717-2722 (2013).
- [169] H. Azazoglu, Potentiometrie in 3-Punkt-Geometrie, Bachelorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2015, 5 f., 17-25.
- [170] S. Hoepken, Rastertunnelmikroskopie mit einem FET-Sensor, Bachelorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2015, 4-8, 12 f.
- [171] M. Flebbe, Tieftemperatur Rastertunnelmikroskopie/-potentiometrie mit einem JFET-Sensor an Kupfer(111), Masterarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2017, 17-21.
- [172] P. Graf, M. Flebbe, D. Utzat, H. Nienhaus und R. Möller, Electrometer with sub-attoampere current load, *Rev. Sci. Instr.* 88, 084702 (2017).
- [173] S. Bauer, Ballistische Elektronenemissionsmikroskopie, Bachelorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg 2011, 4 f.
- [174] W. J. Kaiser und L. D. Bell, Direct Investigation of Subsurface Interface Electronic Structure by Ballistic-Electron-Emission Microscopy, *Phys. Rev. Lett.* 60, 1406 (1988).
- [175] C. A. Bobisch, A. Bannani, Y. M. Koroteev, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov und R. Möller, Conservation of the Lateral Electron Momentum at a Metal-Semiconductor Interface, *Phys. Rev. Lett.* 102, 136807 (2009).
- [176] H. Li, L. Gao, H. Li, G. Wang, J. Wu, Z. Zhou und Z. Wang, Growth and band alignment of Bi₂Se₃ topological insulator on H-terminated Si(111) van der Waals surface, *Appl. Phys. Lett.* 102, 074106 (2013).

Danksagung

Ein Promotionsstudium und die Anfertigung einer Dissertation schafft man nicht ohne Rückhalt in der Familie, bei Freunden und Arbeitskollegen. Ich danke ihnen allen für ihre Hilfe und Unterstützung. Mein besonderer Dank gilt:

- **Prof. Dr. Rolf Möller** für die umsichtige Betreuung während des Promotionsstudiums, insbesondere nach dem Fortgang von C. A. Bobisch, den vielen geduldigen Diskussionen über die Experimente, deren methodischen Grundlagen und den eigentlichen Messergebnissen sowie für die kritische Durchsicht der Dissertation.
- **PD Dr. Christian A. Bobisch** für die Leitung und Betreuung des zu den vorliegenden Messungen gehörigen DFG-Projekts BO 3427/2-1 sowie für die vielen interessanten Konferenzbesuche während der Promotion.
- **Prof. Dr. Hermann Nienhaus** für viele Tipps und Ratschläge zu Inhalt und Form der Dissertation.
- **Prof. Dr. Frank Meyer zu Heringdorf** für die Beratung bei der Konstruktion des Doppelverdampfers (vgl. Kapitel 3.4.4 und 9.1.2).
- **Dipl.-Ing. Detlef Utzat** für die Reparatur, Entwicklung und Aufbau vieler elektrischer Anlagen, insbesondere für die Entwicklung und den Aufbau der Elektronik des Doppelverdampfers (vgl. Kapitel 3.4.4 und 9.1.2).
- **Dipl.-Ing. Doris Tarasevich** für die Hilfe bei der Vakuumtechnik und Arbeitssicherheit im Labor sowie bei der Instandsetzung der Messanlage.
- **Tobias Roos (Industriemeister Metall)** für eine Vielzahl mechanischer Verbesserungen und Reparaturen der Messanlage sowie für die Konstruktion des Doppelverdampfers (vgl. Kapitel 3.4.4 und 9.1.1).
- **Dr. Ben Wortmann** für die umfangreichen Vorbereitungen von Reisen, insbesondere für den Besuch des Vakuumkongresses in Südkorea 2016.
- **M. Sc. Ebru Ekici** für die viele Hilfe und kollegiale Unterstützung während des Promotionsstudiums.
- **M. Sc. Paul Graf** für die Zusammenarbeit im Rahmen seiner Masterarbeit zu Bi-Inseln auf einer Bi₂Se₃-Oberfläche (vgl. Kapitel 5.5).

- **M. Sc. Hüseyin Azazoglu** für die Zusammenarbeit im Rahmen seiner Bachelorarbeit zur Vektorfeldpotentiometrie (vgl. Kapitel 8).
- **M. Sc. Stephanie Hoepken** für die Zusammenarbeit im Rahmen ihrer Bachelorarbeit zum JFET-STM (vgl. Kapitel 8) und ihrer Masterarbeit zum Elektronentransport in Bi_2Te_3 -Proben (vgl. Kapitel 6).
- **B. Sc. Kilian Bartsch** für die Zusammenarbeit im Rahmen seiner Bachelorarbeit zum Doppelverdampfer (vgl. Kapitel 3.4.4 und 9.1) und zum Elektronentransport in Bi-Rekonstruktion auf Si(111) (vgl. Kapitel 5.1).
- **M. Sc. Mandana Soleimani** für die Zusammenarbeit im Rahmen ihrer Masterarbeit zur Morphologie von Bi_2Te_3 -Proben (vgl. Kapitel 6).
- **M. Sc. Kira Kolpatzeck** für die sorgsame Durchsicht der Grundlagenkapitel und die sehr detaillierten Kommentare hierzu.
- **Rosemarie Hullen** für das umfangreiche Lektorat der Endfassung.